

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

Rafael Franklin Lázaro de Cerqueira

**ESTUDO COMPUTACIONAL DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR E DE
MASSA INTERFACIAL EM PARTÍCULAS FLUIDAS ESFÉRICAS E
DEFORMADAS**

Florianópolis

2015

Rafael Franklin Lázaro de Cerqueira

**ESTUDO COMPUTACIONAL DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR E DE
MASSA INTERFACIAL EM PARTÍCULAS FLUIDAS ESFÉRICAS E
DEFORMADAS**

Dissertação submetida ao Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
para a obtenção do grau de Mestre em
Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Emilio E. Paladino, Dr.

Florianópolis

2015

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do
Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Lázaro de Cerqueira, Rafael Franklin
Estudo Computacional da Transferência de Calor e de
Massa em Partículas Fluidas Esféricas e Deformadas / Rafael
Franklin Lázaro de Cerqueira ; orientador, Emilio E.
Paladino - Florianópolis, SC, 2015.
130 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa
Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Mecânica.

Inclui referências

1. Engenharia Mecânica. 2. Volume-of-Fluid. 3. Modelo de
Dois Fluidos. 4. Transferência de Calor Interfacial. 5.
Partículas fluidas distorcidas. I. E. Paladino, Emilio. II.
Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

Rafael Franklin Lázaro de Cerqueira

**ESTUDO COMPUTACIONAL DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR E DE
MASSA INTERFACIAL EM PARTÍCULAS FLUIDAS ESFÉRICAS E
DEFORMADAS**

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de
“Mestre em Engenharia Mecânica”, e aprovada em sua forma final pelo
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis, 29 de Maio 2015.

Prof. Armando Albertazzi Gonçalves Jr., Dr.,
Coordenador do Curso

Prof. Emilio E. Paladino, Dr.,
Orientador

BANCA EXAMINADORA

Prof. Clovis R. Maliska, Ph.D.,
Presidente

Prof. Jader Riso Barbosa Jr, Ph.D.,
Membro

Prof. Henry França Meier, Dr.,
Membro

*Aos meus pais e minha irmã, que desde
o início me incentivaram a chegar até
aqui.*

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Emilio Ernesto Paladino pela orientação e pelos conselhos dados durante esse período muito importante de minha formação.

Aos meus pais e minha irmã que sempre me apoiaram durante todo o momento da minha vida.

A todas as amizades que fiz até esse ponto da minha vida, em especial a Lilian, que conseguiu romper a barreira da amizade e agora é minha melhor amiga e namorada.

A todos os integrantes do SINMEC, que durante esse período sempre foram grandes parceiros dentro e fora do laboratório. Em especial, gostaria de agradecer a oportunidade cedida pela Tati e ao Prof. Maliska, que permitiu desenvolver minha pesquisa de mestrado no SINMEC.

Aos professores do Departamento de Engenharia Mecânica da UDESC-Joinville, que permitiriam adquirir conhecimento suficiente para continuar minha formação.

Ao Prof. Paulo S. Zdanski, que me introduziu a pesquisa acadêmica durante a graduação na UDESC-Joinville e fez crescer a vontade de seguir na continuidade de minha formação.

Por fim, gostaria de agradecer a ANP pelo apoio financeiro, e ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina, que através de seu corpo discente, contribuiu de maneira incomensurável no meu aprendizado.

"There is no royal road to geometry."
(Euclides)

SUMÁRIO

Lista de Figuras	iii
Lista de Tabelas	ix
Lista de Símbolos	xi
Resumo	xix
Abstract	xxi
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	7
1.1.1 Objetivo geral	7
1.1.2 Objetivos específicos	7
1.1.3 Organização da Dissertação	8
2 Fundamentação Teórica e Revisão da Literatura	9
2.1 Métodos de Captura de Interface	9
2.1.1 Métodos de Superfície	10
2.1.1.1 Partículas na Interface	11
2.1.1.2 Malha Coincidente com a Interface	11
2.1.1.3 Método <i>Front-Tracking</i>	12
2.1.1.4 Método <i>Level-set</i>	12
2.1.2 Métodos de Volume	14
2.1.2.1 Marcadores no Fluido	15
2.1.2.2 <i>Volume-of-fluid</i> (VOF)	15
2.2 Correlações para o Cálculo dos Coeficientes de Transferên- cia de Calor e Massa Interfacial	17
3 Metodologia	25
3.1 Modelo Numérico	25

3.2	Sistema de Coordenadas com Referencial Fixo e Móvel	27
3.3	Cálculo dos Perfis Locais da Transferência de Calor Interfacial	31
3.4	Cálculo da Transferência de Calor Interfacial	37
3.5	Planejamento Numérico	38
4	Verificação da Metodologia Proposta	45
4.1	Verificação do Sistema de Coordenadas Referencial	46
4.2	Verificação da Posição das Condições de Contorno	61
4.3	Estudo de Independência de Malha	65
4.4	Validação para Partículas Fluidas Esféricas	72
5	Resultados e Discussão	77
5.1	Morfologia da Interface	78
5.2	Análise Local da Transferência de Calor	83
5.3	Análise Global da Transferência de Calor	105
5.4	Desenvolvimento de uma Correlação para Transferência de Calor Interfacial	109
5.4.1	Correlação Proposta para a Transferência de Calor e de Massa Interfacial	109
5.4.2	Correção da Área Interfacial	114
5.5	Aplicação para um Caso de Referência através do Modelo de Dois Fluidos	116
6	Conclusão e Sugestões	125
6.1	Conclusões deste Trabalho	125
6.2	Sugestões para Trabalhos Futuros	128
	Referências Bibliográficas	129

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Métodos de captura de interface: a) Marcadores na interface; b) Malha acompanhando a interface; c) Fase definida por função indicadora ou marcador.	10
Figura 2.2	Valor da função indicadora da fase 1 (α_1) no domínio computacional.	16
Figura 2.3	Valores de Nu calculados através das diversas correlações expostas nessa seção para diferentes números de Reynolds Re com valor de $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,00$	23
Figura 3.1	Esquema do domínio computacional para o sistema de coordenadas com referencial fixo (inercial), mostrando as condições de contorno e iniciais.	28
Figura 3.2	Esquema do domínio computacional para o sistema de coordenadas com referencial móvel (não-inercial), mostrando as condições de contorno e iniciais.	28
Figura 3.4	(a) Interfaces obtidas para as diferentes iso-superfícies de α_b . (b) Perfil do número de Nusselt local Nu_{local} , calculado pela Equação (3.9), para cada posição assumida da interface.	33
Figura 3.5	Perfil do número de Nusselt local normalizado Nu_{local}^* , dado pela Equação (3.11), para cada posição assumida da interface.	35
Figura 3.6	Comparação entre os perfis de Nu_{local}^* obtidos neste trabalho e os resultados de Oellrich <i>et al.</i> (1973) para $Re = 10,0$ em diferentes números de Pr	36
Figura 3.7	Casos simulados nesse trabalho plotados sobre o mapa de regimes morfológicos encontrado em (Clift <i>et al.</i> (2013),	

	p. 27).....	41
Figura 3.8	Quebra de uma partícula fluida a partir de deformação da cauda. Embora este fenômeno é fisicamente consistente, para essas condições, o método VOF não é capaz de capturá-lo de forma quantitativamente adequada....	42
Figura 3.9	"Skirting", formação da "skirt" (saia, em inglês) na região de recirculação da partícula fluida.	42
Figura 4.1	Re ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 5, 0$	48
Figura 4.2	Re ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 20, 0$	49
Figura 4.3	Re ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60, 0$	50
Figura 4.4	$S_{razão}$ ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 5, 0$	52
Figura 4.6	$S_{razão}$ ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60, 0$	52
Figura 4.5	$S_{razão}$ ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 20, 0$	53
Figura 4.7	Nu_{global} ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 5, 0$	54
Figura 4.8	Nu_{global} ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 20, 0$	55
Figura 4.9	Nu_{global} ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60, 0$	55
Figura 4.10	Esquema da comparação local realizada para comparação dos resultados das diferentes abordagens do sistema de coordenada referencial, mostrando em detalhe a localização das direções de l^*	57
Figura 4.11	Perfil de velocidades u^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 5, 0$	58
Figura 4.12	Perfil de velocidades u^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 20, 0$	58

Figura 4.13	Perfil de velocidades u^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60,0$	59
Figura 4.14	Perfil de temperaturas T^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 5,0$	59
Figura 4.15	Perfil de temperaturas T^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 20,0$	60
Figura 4.16	Perfil de temperaturas T^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60,0$	60
Figura 4.17	Parâmetros geométricos utilizados no estudos paramétricos: a) da posição G da condição de contorno de entrada; b) da posição H da condição de contorno de saída e c) da posição F da condição de contorno de parede. ...	62
Figura 4.18	Comportamento dos valores de Re obtidos para as diferentes distâncias F , G e H com $Eo = 5,0$	63
Figura 4.19	Comportamento dos valores de Re obtidos para as diferentes distâncias F , G e H com $Eo = 30,0$	63
Figura 4.20	Comportamento dos valores de Re obtidos para as diferentes distâncias F , G e H com $Eo = 60,0$	63
Figura 4.21	Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 1,0$ e $\log(Mo) = -7,0$	66
Figura 4.22	Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 5,0$ e $\log(Mo) = -5,0$	67
Figura 4.23	Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 10,0$ e $\log(Mo) = -4,5$	67
Figura 4.24	Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 20,0$ e $\log(Mo) = -3,5$	67
Figura 4.25	Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 30,0$ e $\log(Mo) = -2,0$	68
Figura 4.26	Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 40,0$ e $\log(Mo) = -2,0$	68
Figura 4.27	Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 60,0$ e $\log(Mo) = -1,0$	68

Figura 4.28	Posições estimadas da interface para uma iso-superfície de $\alpha_b = 0,5$ e da camada limite térmica para o caso em que $Eo = 1,0$, $\log(Mo) = -7,0$ e $Pr = 10,0$	70
Figura 4.29	Detalhe mostrando a região da malha computacional entre a interface e a camada limnite térmica para o caso em que $Eo = 1,0$, $\log(Mo) = -7,0$ e $Pr = 10,0$	71
Figura 4.30	Curvas de Nu_{global} obtidas no presente trabalho e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 0,5$	72
Figura 4.31	Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 0,75$	73
Figura 4.32	Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 1,0$	73
Figura 4.33	Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 2,5$	73
Figura 4.34	Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 5,0$	74
Figura 4.35	Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 10,0$	74
Figura 5.1	Morfologia resultante da interface das partículas fluidas conforme alteração das grandezas adimensionais de Re , Eo e Mo	79
Figura 5.2	Dimensões l_h e l_w utilizadas para o cálculo da excentricidade E para diferentes morfologias.	81
Figura 5.3	Comparação da excentricidade das partículas obtidas numericamente (pontos) e a correlação Liu <i>et al.</i> (2015) (linha contínua).	81
Figura 5.4	Resultado numérico das curvas de Re vs. Mo para cada Eo , curvas de ajuste e Re obtido através dos valores de Mo aproximados.	84
Figura 5.5	Morfologia obtida das diferentes partículas fluidas para valores de Eo , contornos dos campos de temperatura e	

	linhas de corrente ao seu redor após alcançar o regime permanente para diferentes números de Prandtl Pr com $Re \approx 20,0$	86
Figura 5.6	Interfaces obtidas para as diferentes iso-superfícies de α_b e a distância normalizada ao longo da interface s^*	88
Figura 5.7	Perfis da velocidade tangencial u_t^* (a) e número de Nusselt local Nu_{local}^* (b) normalizado ao longo da interface para $Re \approx 20,0$ e $Pr = 10,0$	89
Figura 5.8	Número de Nusselt total normalizado $Nu_{0-s^*}^*$ (Equação (5.11)) ao longo da interface para $Pr = 10,0$ e $Re \approx 20,0$. .	91
Figura 5.9	Perfil da espessura da camada limite térmica relativa δ'_{CML} ao longo da interface para diferentes valores do número de Eo para $Re \approx 20,0$ e $Pr = 10,0$. Em detalhe, valor de s^* correspondente na ordenada s'	93
Figura 5.10	Efeito do número de Prandtl Pr na transferência de calor local ao longo da interface para diferentes morfologias (números de Eo) para um mesmo número de Re . . .	94
Figura 5.11	Morfologia obtida das partículas fluidas para valores definidos de Eo e diferentes valores de Re , contornos dos campos de temperatura e linhas de corrente, após alcançar o regime permanente para $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,0$, valores extremos de Pr utilizados neste trabalho.	97
Figura 5.12	Perfis da velocidade tangencial normalizada u_t^* e do Nusselt local normalizado Nu_{local}^* para $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,0$ em diferentes valores de Re e $Eo = 5,0$	99
Figura 5.13	Perfis da velocidade tangencial normalizada u_t^* e do Nusselt local normalizado Nu_{local}^* para $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,0$ em diferentes valores de Re e $Eo = 20,0$	100
Figura 5.14	Perfis da velocidade tangencial normalizada u_t^* e do Nusselt local normalizado Nu_{local}^* para $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,0$ em diferentes valores de Re e $Eo = 60,0$	101
Figura 5.15	Definição do ponto $s_{trans.}^*$, definido como o ponto da interface possui a máxima distância $ d $ entre o centro de volume da partícula fluida localizado em o'	102

Figura 5.16	Importância da região traseira na transferência de calor local para diferentes níveis de deformação (números de Eo e Pr).	103
Figura 5.17	Efeito do número de Eötvös (Eo) nas curvas de Nu_{global} v.s. Pe para diferentes valores de Pr . Os pontos mostram os resultados obtidos das simulações numéricas e as linhas tracejadas correspondem a correlação proposta. . .	106
Figura 5.18	Valores da relação de superfícies S_{razo} para diferentes números de Eo e Re .	108
Figura 5.19	Comportamento do valores de Nu_{global} e Pe para diferentes valores de Eo e Pr .	111
Figura 5.20	Valores obtidos e curvas ajustadas para $b(Eo)$ e $c(Eo)$, expoentes das Equações (5.18) e (5.19).	113
Figura 5.21	Valores obtidos e curvas ajustadas para $m(Eo)$ e $n(Eo)$, coeficientes da Equação (5.22).	115
Figura 5.22	Valores da relação de superfícies $S_{razão}$ para diferentes números de Eo e Re . Os pontos representam os valores numéricos e as linhas tracejadas correspondem a correlação dada pela Equação (5.22).	116
Figura 5.23	Esquema do reator do tipo coluna de bolhas e condições de contorno. A distribuição local das frações mássicas nas proximidades da interface é mostrada, esquematicamente, no detalhe.	119
Figura 5.24	Fração mássica ao longo da coordenada axial z da coluna para a situação em que $Eo = 60,0$ e $Re_{rel} = 40,0$ nos três casos de comparação propostos.	121
Figura 5.25	Fluxo interfacial local ao longo da coordenada axial z da coluna para a situação em que $Eo = 60,0$ e $Re_{rel} = 40,0$ nos três casos de comparação propostos.	121
Figura 5.26	Efeito do número de Eo na distância necessária para atingir a condição de equilíbrio H_{total} em diferentes valores de Re .	122

LISTA DE TABELAS

Tabela 1.1	Variáveis das equações de conservação de um propriedade genérica ϕ_k	3
Tabela 3.1	Dimensões da geometria do domínio computacional em função do diâmetro d_b para o referencial fixo mostrando na Figura 3.1.....	29
Tabela 3.2	Dimensões da geometria do domínio computacional em função do diâmetro d_b para o referencial móvel mostrando na Figura 3.2.....	30
Tabela 4.1	Resumo da comparação entre os dois sistemas de coordenada referencial estudados.....	56
Tabela 4.2	Dimensão dos parâmetros geométricos ilustrados na Figura 4.17 para cada estudo paramétrico em função do diâmetro inicial da partícula fluida d_b	61
Tabela 4.3	Resumo dos parâmetros globais obtidos no estudo paramétrico do posicionamento da condição de contorno de entrada, parâmetro G da Figura 4.17, para os diferentes Eo simulados.	64
Tabela 4.4	Resumo dos parâmetros globais obtidos no estudo paramétrico do posicionamento da condição de contorno de parede, parâmetro F da Figura 4.17, para os diferentes Eo simulados.	65
Tabela 4.5	Resumo dos parâmetros globais obtidos no estudo paramétrico do posicionamento da condição de contorno de saída, parâmetro H da Figura 4.17, para os diferentes Eo simulados.	65

Tabela 5.1	Valores da excentricidade E obtidos das simulações numéricas e calculados a partir da correlação de Liu <i>et al.</i> (2015) para $Eo = 10,0$	82
Tabela 5.2	Valores da excentricidade E obtidos das simulações numéricas e calculados a partir da correlação de Liu <i>et al.</i> (2015) para $Eo = 20,0$	82
Tabela 5.3	Valores da excentricidade E obtidos das simulações numéricas e calculados a partir da correlação de Liu <i>et al.</i> (2015) para $Eo = 30,0$	82
Tabela 5.4	Valores da excentricidade E obtidos das simulações numéricas e calculados a partir da correlação de Liu <i>et al.</i> (2015) para $Eo = 40,0$	83
Tabela 5.5	Valores de $\log(Mo)$ estimados para cada Eo a partir da metodologia descrita, valores de Re obtidos e diferença percentual do número de Reynolds Re^{dif} estimados em relação ao desejado ($Re = 20,0$).	85
Tabela 5.6	Propriedades físicas dos fluidos e parâmetros geométricos do reator do tipo coluna de bolhas utilizado como caso de referência.	120

LISTA DE SÍMBOLOS

a	parâmetro das Equações (5.18) e (5.19) [—]
a_b	aceleração axial da partícula fluida [m/s ²]
a_i'''	densidade de área interfacial [m ² /m ³]
b	parâmetro das Equações (5.18) e (5.19) [—]
c	parâmetro das Equações (5.18) e (5.19) [—]
C_p	calor específico [J/(kgK)]
d	distância entre o centro de volume da partícula fluida \mathbf{o}' e um ponto de sua interface [m]
D^{mass}	difusividade mássica [m ² /s]
d_b	diâmetro da partícula fluida baseado no volume [m]
D_{col}	diâmetro do reator do tipo coluna de bolhas [m]
E	excentricidade [—]
Eo	número de Eötvös [—]
f^ϕ	termo fonte/sumidouro na equação da conservação de uma propriedade conservada ϕ [—/m ³]
F_{ij}	fluxo mássico interfacial de i para j [1/s]
g	gravidade [m/s ²]
h	coeficiente de transferência de calor por convecção [W/(m ² K)]
$H(\bullet)$	função de Heaveside

He	coeficiente de Henry [—]
h_m	coeficiente de transferência de massa por convecção [m/s]
H_{total}	altura necessária para o estado de equilíbrio [m]
$\bar{\mathbf{I}}$	tensor identidade
i	entalpia [J/kg]
\mathbf{j}_k	fluxo difusivo da transferência de massa [mol/(s m ²)]
k	condutividade térmica [W/(mK)]
l	comprimento da reta mostrada na Figura 4.10 [m]
l_h	altura máxima da partícula fluida [m]
l^*	comprimento normalizado da reta mostrada na Figura 4.10 [—]
l_v	comprimento máximo da partícula fluida [m]
m	parâmetro da Equação (5.22) [—]
\mathbf{M}	fluxo da quantidade de movimento interfacial[m/s]
\mathbf{M}^B	quantidade de movimento interfacial relativa a força de Basset [N/m ³]
\mathbf{M}^D	quantidade de movimento interfacial relativa a força de arrasto [N/m ³]
\mathbf{M}^L	quantidade de movimento interfacial relativa a força de sustentação [N/m ³]
\mathbf{M}^V	quantidade de movimento interfacial relativa a força da massa virtual [N/m ³]
\mathbf{M}^W	quantidade de movimento interfacial relativa a força de lubrificação de parede [N/m ³]
Mo	número de Morton [—]
$\hat{\mathbf{n}}$	direção normal da interface [—]
n	parâmetro da Equação (5.22) [—]

Nu	número de Nusselt [—]
Nu_{esfera}	Nu calculado pela Equação (2.22) [—]
Nu_{global}	número de Nusselt global [—]
Nu_{local}	número de Nusselt local [—]
Nu_{local}^*	número de Nusselt local normalizado [—]
Nu_{0-s}^*	número de Nusselt total normalizado [—]
$N_{volumes}$	número de volumes na região onde a malha é refinada, estruturada e uniforme [—]
o	origem do sistema de coordenadas fixo [m]
$O(\bullet)$	ordem de magnitude
o'	origem do sistema de coordenadas móvel [m]
p	pressão [Pa]
Pe	número de Peclet [—]
Pr	número de Prandtl [—]
$Q_{interfacial}$	transferência de calor interfacial total entre a partícula fluida e a fase contínua [W]
q_k	fluxo difusivo da transferência de calor [J/(m ² s)]
Re	número de Reynolds [—]
Re_{rel}	número de Reynolds relativo entre duas fases [—]
S	área interfacial [m ²]
s	distância ao longo da interface [m]
Sc	número de Schmidt [—]
S^{energ}	termo fonte na equação de conservação da energia [W/m ³]
S_{esfera}	área superficial de uma esfera [m ²]
Sh	número de Sherwood [—]

$Sh_{esférico}$	número de Sherwood calculado pela correlação de Takemura & Yabe (1998) [—]
$Sh_{proposto}$	número de Sherwood proposto [—]
$S_{interface}$	área interfacial calculada a partir da iso-superfície de $\alpha_b = 0.50$ [m ²]
s'	distância relativa ao longo da interface [—]
s_{max}	comprimento total da interface [m]
\mathbf{S}^{mom}	termo fonte na equação da conservação da quantidade de movimento [N/m ³]
$S_{razão}$	relação entre a área interfacial ($S_{interface}$) e a área superficial de uma esfera (S_{esfera}) [—]
\mathbf{S}^{σ}	termo fonte responsável pela força de tensão superficial na equação da conservação da quantidade de movimento [N/m ³]
s^*	distância normalizada ao longo da interface [—]
$s_{trans.}^*$	ponto da interface que marca a transição de hemisférios da partícula fluida [—]
$\bar{\bar{\mathbf{T}}}$	tensor tensão superficial [N/m ²]
\mathbf{t}	vetor unitário tangente a interface [—]
T	temperatura [K]
t	tempo [s]
$T_{interface}$	temperatura na interface da partícula fluida [K]
T^*	temperatura normalizada [—]
\mathbf{u}	velocidade [m/s]
U_b^t	velocidade axial média de ascensão da partícula fluida [m/s]
$U_{entrada}$	velocidade axial da condição de contorno de entrada [m/s]
u^*	velocidade axial normalizada [—]

U_t	velocidade terminal da partícula [m/s ²]
u_t	velocidade tangencial [m/s]
u_t^*	velocidade tangencial normalizada [—]
V_{esfera}	volume de uma esfera [m ³]
w	velocidade axial no reator do tipo coluna de bolhas [m/s]
We	número de Weber [—]
\mathbf{x}	posição da interface [m]
x^K	fração mássica de um componente K [kg/kg]

Gregos

α	fração volumétrica [—]
α^{therm}	difusividade térmica [m ² /s]
β	relação de condutividade térmica ($\beta = k_b/k_c$) [—]
χ	relação de viscosidades ($\chi = \mu_d/\mu_c$) [—]
δ_{CLT}	espessura da camada limite térmica [m]
δ'_{CLT}	espessura da camada limite térmica relativa [—]
Δl	comprimento de um volume controle uniforme ΔV ($\Delta l = \Delta r = \Delta z$) [m]
ΔT	diferença de temperatura [K]
Δt	passo de tempo [s]
ΔV	volume de controle bidimensional com dimensão $\Delta V = \Delta r \cdot \Delta z \cdot 1.0$ [m ³]
ϵ	meia espessura artificial da interface [m]
η	propriedade material qualquer da mistura
γ	relação de densidade ($\gamma = \rho_b/\rho_c$) [—]

Γ^ϕ	fluxos de transferência interfaciais da propriedade conservada ϕ [$-/m^3$]
κ	curvatura da interface [m^{-1}]
κ_{geo}	fator geométrico encontrado em Lochiel & Calderbank (1964) [—]
Λ_k	fluxo da transferência de calor interfacial [W/m^3]
μ	viscosidade [Pas]
ν	viscosidade cinemática [m^2/s]
Ω	temperatura adimensionalizada [—]
Φ	função <i>level-set</i> [—]
ϕ	propriedade conservada [—]
Π^ϕ	fluxo difusivo da propriedade conservada ϕ [$-/m^2$]
ψ	parcela de transferência de calor que ocorre na região traseira da partícula fluida [—]
ρ	densidade [kg/m^3]
σ	tensão superficial entre as fases contínua e dispersa [N/m]
$\overline{\overline{\tau}}$	tensor das tensões viscosas [Pa]
τ	tempo virtual de reinicialização [t]
θ	coordenada angular [rad]
Θ_{global}	variável genérica global
Θ_{local}	variável genérica local
Θ_{local}^*	variável genérica local normalizada
Υ_k	fluxo da transferência de massa interfacial [mol/m^3]
ζ	relação de calores específicos ($\zeta = C_{p_b}/C_{p_c}$) [—]

Sobrescritos

(\bullet)^A relativo ao componente A

- $(\bullet)^{dif}$ relativo a diferença percentual
- $(\bullet)^{fixo}$ referente ao sistema de coordenadas fixo
- $(\bullet)^{max}$ referente ao valor máximo
- $(\bullet)^{min}$ referente ao valor mínimo
- $(\bullet)^{móvel}$ referente ao sistema de coordenadas móvel
- $(\bullet)^*$ referente ao valor normalizado

Subscritos

- $(\bullet)_b$ referente a fase dispersa (partícula fluida)
- $(\bullet)_c$ referente a fase contínua
- $(\bullet)_{global}$ referente ao valor global
- $(\bullet)_k$ referente a uma fase qualquer
- $(\bullet)_{local}$ referente ao valor local
- $(\bullet)_{interface}$ referente a interface da partícula fluida

RESUMO

Neste trabalho, a transferência de calor ou massa ao redor de partículas fluidas esféricas e distorcidas escoando a números de Re moderados (até, aproximadamente, $Re = 80$), é estudada através do método *Volume-of-Fluid*, visando o desenvolvimento de uma relação de fechamento para a transferência de calor ou massa no contexto do Modelo de Dois Fluidos. Os números de Nusselt Nu para partículas fluidas são comparados com as correlações usuais presentes na literatura, buscando validar o modelo numérico desenvolvido. Da abordagem adotada no trabalho, baseada na modelagem detalhada da transferência de calor interfacial, é possível analisar a estrutura local do escoamento e do campo térmico ao redor das partículas fluidas, permitindo uma melhor compreensão do efeito da deformação da partícula nos coeficientes de transferência global de calor. É mostrado que a distribuição do fluxo de calor interfacial é alterada pelo formato da partícula, que afeta de maneira significativa o escoamento e o campo de temperaturas ao seu redor e, consequentemente, na transferência de calor total. Além disso, o efeito do aumento da densidade de área interfacial, em função da deformação da partícula, na transferência interfacial de calor total é analisada. Novas correlações são propostas para a transferência de calor interfacial através dos números de Nu e Sh , dependentes do número de Eötvös (Eo). Uma correção, também dependente de Eo , é proposta para a correção da densidade de área interfacial, devendo ser incluída nas relações de fechamento dos termos de transferência de calor ou massa presentes nas equações do Modelo de Dois Fluidos. Um estudo de caso simplificado é apresentado para uma coluna de bolhas, mostrando o impacto da distorção das partículas fluidas na transferência de massa global.

Palavras-chave: Transferência de calor interfacial, Partículas fluidas distorcidas, *Volume-of-Fluid*, Modelo de Dois Fluidos, Colunas de bolhas.

ABSTRACT

In this work, the interfacial heat transfer in spherical and distorted fluid particles, flowing at Re numbers up to 80.0, is studied through the Volume-of-Fluid approach, aiming the development of closure relations for the interfacial heat and mass transfer, in the context of the Two-Fluid Model. The Nusselt numbers of spherical particles are compared with the usual correlations presented in literature to validate the numerical model. From the approach adopted in this work, based on the detailed modeling of the interfacial heat transfer process, it is possible to analyze the local flow structure and thermal field around the fluid particles, providing a better understanding of the effect of the particle deformation on the global heat transfer coefficients. It is shown that the interfacial heat flux distribution is affected by the particles shape, which substantially affects the flow and thermal fields around the fluid particles and, consequently, the total heat transfer rate. In addition, the effect of the increase of the interfacial area density, due to particle deformation, on the total heat transfer is analyzed. New correlations are proposed for the interfacial heat transfer through the Nu and Sh numbers, which become dependent on the Eotvos number (Eu). An additional correction, also dependent on the Eu number, is proposed for the interfacial area density correction, which should be included in the closure of the interfacial heat or mass transfer terms in the Two-Fluid Model equations. A simplified case study is presented for a bubble column to show the impact of the fluid particles distortion on the global interfacial mass transfer.

Keywords: Interfacial Heat Transfer, Distorted fluid particles, *Volume-of-Fluid*, Two-Fluid Model, Bubble column.

INTRODUÇÃO

Escoamentos multifásicos têm ocorrência em quase todas as áreas da indústria do petróleo, química e de transformação de energia. Em geral, esses escoamentos envolvem sistemas multicomponentes em que usualmente há transferência de massa entre fases, seja por variações de pressão, por transferência de calor ou ambos. Escoamentos em colunas de destilação, fornos de unidades de coque e craqueamento catalítico, poços com alta relação de gás-óleo, sistemas de elevação artificial e tratamento primário, são alguns de muitos exemplos onde se faz necessária a modelagem de escoamentos multifásicos.

Em determinadas aplicações envolvendo transferência de calor e massa na indústria de óleo e gás, a modelagem detalhada dos processos de transferência de calor e massa se torna fundamental, por exemplo, no estudo de problemas de garantia de escoamento, como deposição de ceras e formação de hidratos e problemas de corrosão por CO_2 e H_2S (Yan & Che, 2011). Esta última situação é muito presente no caso da exploração no Pré-sal, onde os reservatórios contêm alto teor de CO_2 . Na indústria química e petroquímica, a necessidade desses modelos mais detalhados é imprescindível no processo de refino como, por exemplo, no projeto de colunas de destilação e reatores de coluna de bolhas (Kantarci *et al.*, 2005; Krishna & van Baten, 2002; Krishna & Van Baten, 2003; Singh & Majumder, 2011).

Bolhas de diferentes formatos e tamanhos são encontrados em diferentes padrões de escoamento, abrangido de bolhas esféricas em escoamento

mentos dispersos do tipo borbulhado a bolhas de Taylor em escoamentos do tipo golfadas. Mesmo em escoamento do tipo golfadas, pequenas bolhas dispersas escoam nos *slugs* líquido localizados entre bolhas de Taylor.

A simulação desses tipos de escoamentos requer modelos precisos para o fechamento das transferências interfaciais, em modelos unidimensionais, utilizados na modelagem de escoamentos em poços e dutos de transferência (Adewumi & Mucharam, 1990; Vincent & Adewumi, 1990; Zaghloul *et al.*, 2007), como modelos detalhados multidimensionais, empregados na modelagem de escoamentos em bombas, separadores, componentes de elevação e tratamento primário de petróleo, colunas de destilação e reatores de colunas de bolhas.

Para essas aplicações, modelos baseados em médias (Ishii & Hibiki, 2011; Wallis, 1969) devem ser utilizados, uma vez que é inviável do ponto de vista do custo computacional, desenvolver simulações "diretas" da dinâmica das interfaces, isto é, capturando a posição instantânea das interfaces. A aplicação consistente da formulação média nas equações retorna valores médios das propriedades do fluido e elimina a necessidade de acompanhar explicitamente a interface e/ou flutuações locais das propriedades (Faghri & Zhang, 2006; Ishii & Hibiki, 2011). Uma discussão mais detalhada sobre o assunto pode ser encontrada em Faghri & Zhang (2006) e Ishii & Hibiki (2011), onde são apresentadas as técnicas de aplicação das formulações médias e modelos baseados nas mesmas.

Dentro dos modelos baseados em médias, o Modelo de Dois Fluidos TFM (do termo, em inglês, *Two-Fluid Model*) possui grande aceitação em aplicações de engenharia, sendo encontrado em diversos pacotes comerciais de softwares de fluidodinâmica computacional (ANSYS, 2014a,b; CD-Adapco, 2012), conhecida por CFD (do termo, em inglês, *Computational Fluid Dynamics*).

Neles, em função da aplicação da formulação média, as informações locais relativas à interação entre as diferentes fases são perdidas e necessitam ser novamente introduzidas a partir de relações de fechamento. A equação de conservação genérica do Modelo de Dois Fluidos é mostrada em sua forma canônica na Equação (1.1) para cada fase k ,

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k \phi_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}_k \phi_k) = \nabla \cdot (\alpha_k \Pi_k^\phi) + \alpha_k \rho_k f^\phi + \Gamma_k^\phi \quad (1.1)$$

em que, para cada fase, ϕ é a propriedade conservada, Π^ϕ é seu fluxo

difusivo, f^ϕ é um termo fonte/sumidouro e Γ_k^ϕ é o termo responsável pelos fluxos de transferência interfaciais. Na Tabela 1.1 são definidas as propriedades e equações governantes que as mesmas podem representar em um escoamento sem mudança de fase, incompressível e sem reações químicas.

Tabela 1.1 – Variáveis das equações de conservação de um propriedade genérica ϕ_k .

Equação de Conservação	ϕ_k	Π_k^ϕ	f^ϕ	Γ_k^ϕ
Massa	1	0	0	0
Quantidade de movimento	\mathbf{u}_k	$\overline{\overline{\tau}}_k$	\mathbf{g}	\mathbf{M}_k
Energia	$i_k = C_{p_k} T_k$	\mathbf{q}_k	0	Λ_k
Espécie	C_k	\mathbf{j}_k	0	Υ_k

Para a transferência da quantidade de movimento interfacial \mathbf{M}_k , o termo é modelado através de relações de fechamento. Um modo simples de modelá-lo é através da combinação linear de forças interfaciais conhecidas (Ishii & Hibiki, 2011), como

$$\mathbf{M}_k = \mathbf{M}_k^D + \mathbf{M}_k^V + \mathbf{M}_k^B + \mathbf{M}_k^L + \mathbf{M}_k^W \quad (1.2)$$

em que \mathbf{M}_k^D , \mathbf{M}_k^V , \mathbf{M}_k^B , \mathbf{M}_k^L , \mathbf{M}_k^W são as parcelas relativas a força de arrasto, força da massa virtual, força de Basset, força de sustentação e a força de lubrificação de parede. Os termos presentes na Equação (1.2) possuem uma quantidade considerável de relações de fechamento na literatura (Clift *et al.*, 2013; Ishii & Hibiki, 2011), incluindo correlações onde as partículas encontram-se distorcidas (não-esféricas).

Por outro lado, para a modelagem da transferência de calor Λ_k e massa Υ_k , na ocorrência de padrões de escoamentos dispersos, a prática usual é a utilização de correlações baseadas nos números de Reynolds Re e Prandtl Pr para a transferência de calor, ou Schmidt Sc para processos envolvendo transferência de massa. Entretanto, essas correlações consideram bolhas perfeitamente esféricas, o que pode induzir a discrepâncias significantes no cálculo da transferência de calor ou massa interfacial em situações nas quais os balanços de forças nas proximidades da interface levam a distorção das partículas.

De outro modo, é comum a aplicação de modelos de captura de interfaces, como *Volume-of-Fluid* (VOF), *Level-set* e o método de acom-

panhamento de interface (do inglês, *Front-Tracking method*) para estudos fundamentais visando o entendimento detalhado do escoamento nas proximidades das interfaces de forma a obter coeficientes de transferência interfacial, que devem ser fornecidos nos modelos baseados em médias (Krishna & Van Baten, 2003; Singh & Majumder, 2011). Além disso, também são desenvolvidos estudos experimentais procurando caracterizar as interações entre fases, com o objetivo de subsidiar modelos baseados em médias (LeClair & Hamielec, 1971; Lochiel & Calderbank, 1964; Oellrich *et al.*, 1973; Ranz & Marshall, 1952; Takemura & Yabe, 1998).

De forma geral, estes estudos consideram escoamentos com comportamento termodinâmico simples, como sistemas água-ar, e focam na caracterização das interações entre fases, principalmente, em termos de transferência de quantidade de movimento. Alguns trabalhos (Haelssig *et al.*, 2010; Liovic & Lakehal, 2007; Pandelaers *et al.*, 2011) incluem a modelagem da transferência de massa interfacial em escoamentos com morfologias de interfaces simples, como escoamentos estratificados de bolhas.

Para a situação de uma única bolha ascendendo em um meio infinito, alguns trabalhos estudam o efeito dos balanço das forças de inércia, viscosas e de tensão superficial na morfologia da interface, desconsiderando a transferência de calor e massa entre as fases. Ohta *et al.* (2005) estuda o problema numericamente, verificando se o formato inicial da bolha, definido como condição inicial na simulação numérica, afeta a morfologia final da interface. O trabalho faz uso do método de captura de interfaces CLSVOF (*Coupled Level-Set Volume-Of-Fluid*), utilizando um sistema de coordenadas com referencial móvel e tratando o escoamento como axissimétrico. De acordo com os resultados do trabalho, o formato inicial da partícula fluida só afeta a solução final para situações onde o Eo é elevado ($Eo = O(100)$) devido a aspectos numéricos. No trabalho de Hua & Lou (2007) o trabalho também é abordado numericamente através do método *Front-Tracking*, empregando também um sistema de coordenadas com referencial móvel e assumindo axissimetria. O objetivo do estudo é comparar a morfologia das partículas fluidas obtidas através do método e das hipóteses assumidas com resultados experimentais e a correlação gráfica de Clift *et al.* (2013). Os resultados obtidos pelos autores apresentam grande concordância com os resultados experimentais. Os mesmos autores estendem o código desenvolvido para tratar o problema

em três dimensões em Hua *et al.* (2008), obtendo novamente grande concordância entre as morfologias obtidas. A tridimensionalidade é introduzida no código numérico para o estudo da interação entre duas ou mais partículas. Experimentalmente, Liu *et al.* (2015) analisa o formato, trajetória e velocidade terminal de bolhas de ar de diferentes diâmetros imersas em água e soluções aquosas de glicerol através de imagens produzidas por uma câmera rápida. O diâmetro das bolhas de ar é calculado a partir das imagens obtidas. Para bolhas de ar ascendendo em água, observa-se que pequenos diâmetros resultam em partículas esféricas que não se deformam e seguem uma trajetória ascendente retilínea, porém à medida que o diâmetro é aumentado a partícula fluida se deforma e tem sua trajetória alterada, resultando em movimentos ascendentes helicoidais e "zigue-zague", com a presença de instabilidades na morfologia da interface devido a baixa viscosidade do líquido. Em um meio mais viscoso, soluções aquosas de glicerol, as bolhas de ar também deformam-se a partir de certo diâmetro inicial e ascendem em trajetórias retilíneas estáveis até determinado diâmetro de bolha.

Uma das principais dificuldades na modelagem de escoamentos multifásicos, multicomponentes e não-isotérmicos é a captura da interface, bem como a quantificação dos mecanismos de transferência interfacial entre as fases presentes no domínio de cálculo. Uma parte significativa dos trabalhos que exploram a transferência de calor e massa interfacial utiliza-se de métodos de captura de interface, fazendo uso do VOF (Bothe & Fleckenstein, 2013; Hayashi & Tomiyama, 2011; Marschall *et al.*, 2012), Level-Set (Wang *et al.*, 2008; Yang & Mao, 2002, 2005) e *Front-Tracking* (Aboulhasanzadeh *et al.*, 2012, 2013; Darmana *et al.*, 2006; Koynov *et al.*, 2005). Para a introdução dos fenômenos de transferência de calor e massa interfacial nos modelos, algumas abordagens são encontradas na literatura. No trabalho recente de Marschall *et al.* (2012), os autores propõem um novo método para o cálculo dos fluxos de transferência de massa interfacial, denominado Continuous-Species-Transfer (CST), baseado em uma analogia com o conhecido modelo Continuous-Surface-Force (CSF) (Brackbill *et al.*, 1992). Através dessa abordagem, é possível modelar a descontinuidade do campo de concentrações na interface decorrente de situações em que o coeficiente do equilíbrio é diferente de um valor unitário, no contexto do modelo VOF. Outra alternativa é calcular a transferência interfacial de calor e massa através de um balanço global de energia

ou massa, como feito por Hase & Weigand (2004) e Wang *et al.* (2008). Outros autores também propuseram o uso de métodos multi-escala (Aboulhasanzadeh *et al.*, 2012, 2013; Bothe & Fleckenstein, 2013) que em geral, são baseados no uso de soluções conhecidas, provenientes da teoria da camada limite, para predição da transferência de calor ou massa nas proximidades da interface. A motivação para o uso dessa categoria de métodos é a redução do esforço computacional no cálculo da transferência interfacial, uma vez que para casos onde o número de Schmidt Sc ou Prandtl Pr são elevados, a camada limite térmica ou de concentração é demasiadamente fina para ser resolvida em malhas computacionais praticáveis. Aboulhasanzadeh *et al.* (2013) demonstra que o emprego de métodos multi-escala apresenta boa concordância quando comparados a resultados experimentais em situações de alto Sc , apesar das várias hipóteses incluídas na simplificação.

Outra alternativa para a modelagem da transferência de calor e massa interfacial é a utilização de malhas computacionais coincidentes com a interface, fazendo uso de coordenadas curvilíneas e alta resolução nas proximidades da superfície da partícula fluida. Figueroa-Espinoza & Legendre (2010), através dessa técnica, estudaram a transferência de massa ao redor de uma bolha esferoidal ascendendo em um meio líquido estacionário em diferentes configurações e condições de regimes de escoamento e geometrias, analisando a transferência local e global de massa. A grande desvantagem dessa abordagem é a imposição da morfologia da interface, que, na realidade, é resultado do balanço das forças de inércia, viscosas e de tensão superficial, impedindo os resultados obtidos de serem correlacionados com os parâmetros adimensionais adequados que descrevem o fenômeno. Além disso, algumas hipóteses a respeito do escoamento ao redor da interface, que, nessa abordagem corresponde a uma condição de contorno, precisam ser assumidas. Em grande parte dos casos, condições de deslizamento ou não-deslizamento são assumidas, para altas e baixas relações de viscosidade, respectivamente, não sendo uma prática consistente em muitas situações. Outra observação importante do trabalho de Figueroa-Espinoza & Legendre (2010) é a discussão sobre a necessidade de fatores de correção na densidade de área interfacial, que levam em conta os efeitos do distanciamento do formato esférico em aplicações de transferência de massa em modelos baseados em médias.

Nesse contexto, esta dissertação de mestrado é motivada pela necessidade da determinação dos coeficientes de transferência de calor e massa interfacial em partículas fluidas com diferentes morfologias de interface para implementação em modelos baseados em médias. Desse modo, um estudo sistemático foi realizado através do modelo *Volume-of-Fluid* (VOF) para caracterizar, de forma detalhada, o escoamento e a transferência de calor ou massa ao redor de partículas fluidas em diferentes morfologias de interface.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo geral

Determinar, através da modelagem detalhada do escoamento ao redor de partículas fluidas com diferentes morfologias de interface, os coeficientes de transferência de calor e massa interfacial, procurando entender como o formato da interface afeta os processos de transferência e, por fim, propor correlações de fechamento para a transferência global de calor e massa necessárias em modelos baseados em médias.

1.1.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos desta dissertação consistem em:

- desenvolvimento de uma rotina para alteração do sistema de coordenadas fixo para o móvel, através da modificação das condições de contorno e termos fonte das equações governantes no código comercial ANSYS FLUENT. 15.0[®];
- desenvolvimento de uma rotina para o cálculo da transferência global de calor interfacial no código comercial ANSYS FLUENT 15.0[®];
- análise da influência da deformação da interface nos campos de velocidade e temperatura ao redor das partículas fluidas e o efeito nos perfis locais de transferência de calor interfacial;
- cálculo dos coeficientes de transferência global de calor interfacial para diferentes valores de parâmetros adimensionais (Eo e Re) que resultarão em diferentes níveis de deformação das partículas fluidas;

- proposta e cálculo de uma variável de correção para a transferência de calor interfacial global, introduzindo o efeito da alteração da área interfacial para os diferentes regimes de escoamento e deformação;
- desenvolvimento e criação de correlações para a transferência global de calor interfacial e alteração da área interfacial para partículas fluidas com diferentes morfologias;
- avaliação do efeito da deformação das partículas fluidas na transferência de calor/massa global através da aplicação do Modelo de Dois Fluidos em um caso de referência.

1.1.3 Organização da Dissertação

A dissertação encontra-se organizada do seguinte modo:

- Capítulo 2 - são apresentados os fundamentos teóricos adotados na elaboração da dissertação com foco nas metodologias para acompanhamento de interfaces e uma revisão das correlações existentes para o cálculo da transferência de calor em partículas fluidas.
- Capítulo 3 - é discutida a metodologia empregada nesta dissertação, mostrando detalhes do modelo numérico e do procedimento de cálculo da transferência global de calor interfacial.
- Capítulo 4 são expostos os resultados das verificações da metodologia e do modelo descrito e utilizado neste estudo.
- Capítulo 5 são mostrados os resultados obtidos nesta dissertação, para as análises local e global da transferência de calor interfacial e a discussão sobre os mesmos. Também são propostas correlações para a transferência de calor interfacial para serem incorporadas no Modelo de Dois Fluidos, e como forma de verificá-las, um caso simplificado utilizando este modelo é estudado.
- Capítulo 6 são apresentados as conclusões desta dissertação e sugestões para trabalhos futuros.

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO DA LITERATURA

O presente capítulo é dividido em duas seções, na primeira é apresentada uma revisão teórica dos métodos de captura de interface encontrados na literatura. A segunda seção apresenta uma revisão da literatura das correlações existentes para a transferência de calor e massa interfacial em partículas fluidas que são utilizadas para fechamento de modelos baseados em médias.

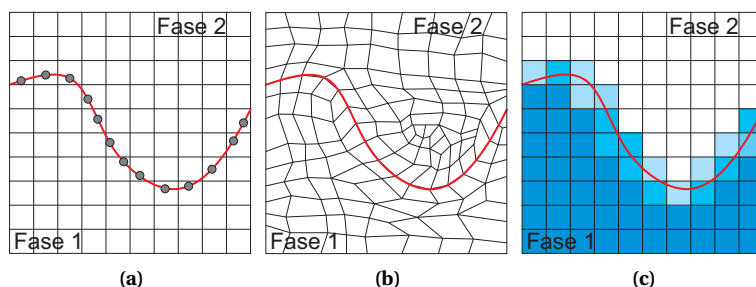
2.1 Métodos de Captura de Interface

Em determinadas aplicações onde a interface das diferentes fases é bem definida e com escalas de comprimento relativamente grandes em relação ao domínio de cálculo, pode-se assumir que as mesmas apresentam um campo de velocidades compartilhado e as equações médias não são mais resolvidas para cada fase, mas tornam-se uma só, dando origem ao modelo homogêneo (Ishii & Hibiki, 2011; Rosa, 2012). Desta forma, resolve-se um único campo de velocidades (ou temperaturas, concentrações, etc.) compartilhado entre as fases, sendo que a presença de uma determinada fase é função do tempo e espaço. Para essa classe de problemas, em razão das diferentes fases serem tratadas com um único fluido, não há a necessidade da utilização de correlações de fechamento para a

transferência interfacial. Porém, para a correta definição das propriedades materiais e distinção das fases, a interface necessita ser resolvida e capturada com adequada precisão. Assim, algum método de captura de interfaces deverá ser utilizado e as suas equações deverão ser resolvidas em conjunto com as equações governantes da mistura.

De acordo com Ferziger & Perić (1996), os métodos de captura de interface podem ser divididos em dois grupos: i) métodos baseados em superfície e ii) métodos baseados em volume. A esquematização dos dois métodos pode ser observada na Figura 2.1.

Figura 2.1 – Métodos de captura de interface: a) Marcadores na interface; b) Malha acompanhando a interface; c) Fase definida por função indicadora ou marcador.



Fonte: Adaptado de Ubbink (1997)

Na Figura 2.1a, a interface é definida por marcadores, cujo acompanhamento individual de cada marcador indica a posição da interface. Agora, na Figura 2.1b a malha computacional é forçada a se mover com a interface. Esses dois esquemas encaixam-se na categoria dos métodos baseados em superfície. Nos métodos baseados em volume, a interface é definida pelos seus volumes adjacentes que definem a fase por meio de marcadores ou funções indicadoras, como visto na Figura 2.1c. Mais detalhes sobre as duas abordagens são apresentados nas subseções seguintes.

2.1.1 Métodos de Superfície

Nessa classe, a posição da interface é calculada através de interpolações entre os pontos (ou marcadores). A vantagem do método é o fato de captar interfaces bem definidas à medida que a mesma é transportada ao

longo da malha, facilitando o cálculo da curvatura da interface, parâmetro necessário para o cálculo da força de tensão superficial. A seguir, são apresentadas algumas formas de marcação da interface.

2.1.1.1 Partículas na Interface

Nesse método, a interface é definida através de partículas conectadas que são advectadas em uma malha fixa pelas velocidades locais resultantes, conforme ilustrado na Figura 2.1a. Uma vez que estas partículas são acompanhadas ao longo de sua trajetória, esta classe de métodos é também chamada de "acompanhamento Lagrangeano" (do inglês, *Lagrangian Interface Tracking*). O método possui algumas desvantagens, como visto em Ubbink (1997), sendo a principal delas o fato da necessidade de apagar e criar novas partículas ao longo das iterações, uma vez que as partículas não mantêm seu espaçamento ao longo do movimento da interface.

2.1.1.2 Malha Coincidente com a Interface

Nesse método a malha computacional é gerada de forma que as faces dos elementos ou volumes de controle coincidam com a interface, e a posição de seus nós é atualizada a partir da velocidade da mesma. Ubbink (1997) cita alguns trabalhos que utilizam esse método, bem como a razão por sua preferência, sendo elas: i) redução do armazenamento computacional devido a não necessidade do uso de marcadores; ii) facilidade de capturar grandes mudanças de direção na interface e iii) evitar células parcialmente ocupadas (ou vazias no caso de escoamentos livres entre água-ar).

A grande vantagem de sua utilização também está na facilidade e precisão da aplicação das condições de contorno, uma vez que a interface se movimenta com a malha. Por outro lado, no caso de grandes deformações, a malha sofrerá grandes distorções, sendo necessária a criação de novas malhas durante o processo, adicionando complexidade ao método e maior esforço computacional, além de dificultar a conservatividade do método.

2.1.1.3 Método *Front-Tracking*

De acordo com Faghri & Zhang (2006), essa classe pode ser definida como uma combinação entre o método de superfície e volume, pelo fato de incorporar em parte o conceito do método de partículas na interface e uma função que indica a presença das diferentes fases. Na técnica desenvolvida por Unverdi & Tryggvason (1992), a interface e sua posição são definidas a partir de pontos marcadores que são transportados pelo campo de velocidades compartilhado entre as duas fases, de forma parecida com a mostrada na Figura 2.1a. A partir da posição da interface definida com o auxílio dos pontos marcadores, o domínio físico é discretizado por uma malha computacional fixa e outra móvel, como visto na Figura 2.1b. Como a presença ou não de certa fase em uma determinada região do domínio é representada por uma função indicadora, apenas um conjunto de equações governantes precisa ser resolvido. Os valores na interface são computados mediante funções de interpolação e o método não é necessariamente conservativo devido a necessidade de criação/destruição dos pontos que definem a interface em determinadas situações.

2.1.1.4 Método *Level-set*

Uma função contínua, conhecida como *level-set function* Φ é definida em todo o domínio computacional (Osher & Sethian, 1988; Sethian & Smereka, 2003). O valor de Φ representa uma função qualquer, sendo ela

$$|\Phi(\mathbf{x})| = d(\mathbf{x}) = \min_{x_I \in I} (|\mathbf{x} - \mathbf{x}_I|) \quad (2.1)$$

em que I representa a interface entre as duas fases, $\Phi(\mathbf{x}) > 0$ representa um lado da interface e $\Phi(\mathbf{x}) < 0$ o outro. A advecção de Φ não é realizada de maneira conservativa, ou seja, o volume dentro da curva ou superfície de nível ($\Phi=0$) não é conservado. Essa é uma das maiores desvantagens do método e formas de contornar esse problema são propostas em Olsson & Kreiss (2005), Sussman & Puckett (2000) e Yang & Mao (2002).

A representação das descontinuidades entre as propriedades ao longo

da interface é dada pela função de Heaviside $H(\Phi)$:

$$\begin{cases} H(\Phi) = 0, & \Phi < 0 \\ H(\Phi) = 1, & \Phi > 0 \end{cases} \quad (2.2)$$

Para os cálculos computacionais, em função da dificuldade de se reproduzir a descontinuidade entre as fases, é proposta uma função de Heaviside modificada, como em Olsson & Kreiss (2005)

$$H_m(\Phi) = \begin{cases} 0, & \Phi < -\epsilon \\ \frac{1}{2} + \frac{\Phi}{2\epsilon} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{\pi\Phi}{\epsilon}\right), & -\epsilon < \Phi < \epsilon \\ 1, & \Phi > \epsilon \end{cases} \quad (2.3)$$

em que ϵ corresponde à metade de uma espessura artificial da interface, haja visto que por definição ela não possui volume e massa.

Nesse método, uma propriedade material qualquer η da mistura é uma função de Φ . Para uma mistura bifásica ($k = 1, 2$), tem-se:

$$\eta(\Phi) = \eta_1 + (\eta_2 - \eta_1)\Phi \quad (2.4)$$

As direções normais $\hat{\mathbf{n}}$ e curvaturas κ são facilmente obtidas nesse método de captura de interface, através de

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\nabla \Phi}{|\nabla \Phi|} \quad (2.5)$$

e

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \Phi}{|\nabla \Phi|} \right) \quad (2.6)$$

Assumindo que a interface é advectada por um campo de velocidades \mathbf{u} , ou seja, para cada ponto \mathbf{x} da interface tem-se

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}). \quad (2.7)$$

A equação evolutiva é usada para avançar a função *level-set* Φ ao

longo do domínio é (Osher & Sethian, 1988),

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \Phi = 0 \quad (2.8)$$

Para um escoamento incompressível ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$), e a Equação (2.8) torna-se,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\Phi \mathbf{u}) = 0 \quad (2.9)$$

Após algumas iterações, Φ não mais será uma função de distância ($|\nabla \Phi| \neq 1$), mesmo que a interface avance com a velocidade correta \mathbf{u} . Assim, passada algumas iterações, é necessário reinicializar os valores Φ . Uma das formas geralmente utilizadas para realizar a reinicialização de Φ é (Sussman *et al.*, 1994),

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} = \text{sign}(\Phi_0)(1 - |\nabla \Phi|), \quad (2.10)$$

em que Φ_0 é a função *level-set* no tempo computacional ($\Phi_0(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x}, \tau = 0)$), τ é um tempo virtual de reinicialização e *sign* é a função sinal. Utilizando essa abordagem, à medida que $|\nabla \Phi|$ se afasta de 1, os valores de Φ_0 próximos da interface são alterados e Φ se tornará novamente uma função de distância.

Entretanto, na reinicialização o método torna-se não conservativo, sendo necessário algumas ações para conservar a área da interface (ou volume para um caso tridimensional) delimitada por $-\epsilon < \Phi < \epsilon$. Yang & Mao (2002) utilizam a Equação (2.10) em conjunto com equações de conservação de área para resolver o problema. Já Sussman & Puckett (2000), apresentam o *coupled level set/volume-of-fluid* (CLSVOF) que utiliza o uso das propriedades conservativas do VOF e a facilidade das aproximações das curvaturas e normais do *level-set*.

2.1.2 Métodos de Volume

Da Figura 2.1c pode-se observar que não há um cálculo explícito da posição da interface nos métodos de volume. Ela é calculada implicitamente através de algoritmos de reconstrução da interface que analisam os marcadores ou as funções indicadores de fase.

O fato da interface não ser obtida explicitamente não gera grandes problemas em termos dependentes da normal $\hat{\mathbf{n}}$ e curvatura κ , pois tal

desvantagem é facilmente contornada por modelos em que as forças de tensão superficial σ , que atuam em superfícies, são modeladas como termos fontes nos volumes de controle computacional, como o modelo *Continuous Surface Force* (CSF) de Brackbill *et al.* (1992) e o *Continuos Surface Stress* (CSS) de Lafaurie *et al.* (1994).

2.1.2.1 Marcadores no Fluido

O primeiro trabalho a propor essa forma de acompanhamento de interface foi o método *marker and cell* (MAC) desenvolvido por Harlow & Welch (1965), baseado na distribuição de células marcadoras sem massa ao longo do domínio computacional de uma superfície livre. Nele, elementos que apresentam a célula marcadora são preenchidos pelo fluido, enquanto que o contrário indica um elemento vazio. A interface é definida pelos elementos adjacentes, como comentando anteriormente. Alguns trabalhos seguiram utilizando essa mesma metodologia, porém com algumas modificações.

De acordo com Ubbink (1997), o método é atrativo pela possibilidade de tratar fenômenos complexos, como quebra de ondas, e facilidade de ser estendido para três dimensões. Uma das desvantagens de sua utilização é o excesso de armazenamento computacional requerido, uma vez que memória é requerida para guardar a posição das células marcadoras.

2.1.2.2 Volume-of-fluid (VOF)

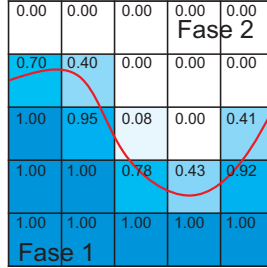
Aqui, uma função escalar de fase α_k é usada para diferenciar duas fases no domínio computacional (Hirt & Nichols (1981)). Em um escoamento bifásico ($k = 1, 2$), o valor de α_1 igual a um indica a presença da fase 1, o valor de α_1 igual a zero indica o valor de outro fluido e valores intermediários indicam a presença da interface. Assim, para cada volume,

$$\sum_k \alpha_k = 1 \quad (2.11)$$

em que k é o número de fases presentes.

A Figura 2.2 ilustra bem as situações descritas, onde a função da indicadora de fase 1 (α_1) é mostrado para cada volume de controle.

Figura 2.2 – Valor da função indicadora da fase 1 (α_1) no domínio computacional.



Fonte: Adaptado de Ubbink (1997)

No VOF, uma propriedade material qualquer η da mistura é uma função de α_k , tomando como exemplo uma mistura bifásica, tem-se:

$$\eta(\alpha_1) = \eta_1 \alpha_1 + \eta_2 (1 - \alpha_1) \quad (2.12)$$

A utilização da função escalar de fase α_k traz grandes vantagens pelo fato de: i) apenas uma variável ser guardada em cada célula, ao contrário do MAC, ii) o valor de α_k ser advectado através de uma equação de transporte (Equação (2.13)) e iii) apenas um conjunto de equações é resolvido, como apresentado nas seções seguintes.

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \alpha_k) = 0 \quad (2.13)$$

Por outro lado, o método necessita de um esquema para reconstrução geométrica da interface e funções de interpolação que tratem de maneira adequada o transporte (advecção) do escalar α_k , evitando oscilações e difusões numéricas. Ubbink (1997) comenta sobre tais tópicos, demonstrando alguns esquemas de reconstrução de interface utilizados e funções de interpolação que modelam o campo escalar de α_k de modo a contornar os problemas inerentes à sua natureza.

2.2 Correlações para o Cálculo dos Coeficientes de Transferência de Calor e Massa Interfacial

Os coeficientes de transferência de calor e massa interfacial para partículas fluidas são, em sua grande maioria, fornecidos por correlações envolvendo números adimensionais. Essas correlações calculam o número de Nusselt Nu para a transferência de calor e o número de Sherwood Sh para a transferência de massa, grandezas adimensionais definidas nas Equações (2.14) e (2.15):

$$Nu = \frac{h d_b}{k_c} \quad (2.14)$$

$$Sh = \frac{h_m d_b}{D_c^{mass}} \quad (2.15)$$

em que h é o coeficiente de transferência de calor por convecção, h_m é o coeficiente de transferência de massa por convecção, k_c é a condutividade térmica da fase contínua e D_c^{mass} é a difusividade mássica da fase contínua.

Em função da analogia entre os dois fenômenos, as correlações propostas para o cálculo do número de Nusselt e Sherwood são correspondentes entre si, podendo ser aplicados para situações envolvendo transferência de calor ou massa. Estas correlações são geralmente expressas em função do número de Reynolds e do número de Schmidt Sc ou Prandtl Pr , quando diz-se respeito a transferência de calor e massa, respectivamente.

O número de Reynolds Re é a relação entre o fluxo convectivo e o fluxo difusivo da quantidade de movimento. Para o cálculo da transferência interfacial em partículas fluidas escoando em uma fase contínua, esse parâmetro deve ser expresso em função das velocidades relativas como,

$$Re = \frac{\rho_c d_b |\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_b|}{\mu_c} \quad (2.16)$$

em que ρ_c e μ_c são a densidade e a viscosidade da fase contínua, d_b é o diâmetro da partícula fluida e \mathbf{u} a velocidade.

O número de Prandtl Pr dá a razão entre a difusividade de quantidade de movimento e a difusividade térmica, sendo o número de Schmidt Sc , o seu análogo para transferência de massa. Em um sentido físico, as grandezas adimensionais relacionam a espessura da camada limite hi-

drodinâmica com a espessura da camada de limite térmica ou de transferência de massa, sendo expressas por,

$$Pr = \frac{\nu_c}{\alpha_c^{therm}} \quad (2.17)$$

$$Sc = \frac{\nu_c}{D_c^{mass}} \quad (2.18)$$

em que ν_c é a viscosidade cinemática da fase contínua, α_c^{therm} e D_c^{mass} são as difusividades térmica e mássica da fase contínua, respectivamente.

Há na literatura, uma quantidade considerável de estudos voltados a investigação da transferência de calor e massa ao redor de partículas fluidas. Entretanto, grande parte das correlações propostas para a transferência de calor e massa interfacial consideram apenas partículas esféricas. Nessa seção, algumas dessas correlações propostas são revisadas e suas equações são escritas, por uma questão de simplicidade, para a transferência de calor. De acordo com a analogia entre os fenômenos de transferência de calor e massa pode-se considerar que,

$$Nu \longleftrightarrow Sh \quad (2.19)$$

$$Pr \longleftrightarrow Sc \quad (2.20)$$

Em grande parte de aplicações no Modelo de Dois Fluidos, em particular nos softwares comerciais de CFD (ANSYS, 2014a,b), a correlação de Ranz & Marshall (1952) é muito utilizada para estimar coeficientes de transferência de calor e massa. Nesse trabalho, os autores conduziram uma investigação experimental da taxa de evaporação em gotas esféricas, verificando a analogia entre a transferência de calor e massa, propondo assim uma relação que incorpora os efeitos da difusão e da convecção forçada de calor e massa. A correlação é expressa por,

$$Nu = 2,0 + 0,6Re^{0,5}Pr^{0,33} \quad (2.21)$$

Nessa correlação, a transferência de calor puramente difusiva é representada por $Nu = 2,0$ enquanto que o segundo termo adiciona uma parcela relativa a convecção forçada. Após sua publicação, grande parte das correlações propostas realizadas em outros trabalhos propõe uma forma semelhante para separação dos efeitos difusivos e convectivos, até mesmo

propondo correções e modificações da Equação (2.21).

Para partículas fluidas esféricas, Lochiel & Calderbank (1964), utilizando o campo de velocidades obtido por Chao (1962), assumindo Re elevados e fazendo uso da teoria de camada limite, encontraram para Pr elevados a seguinte expressão para o cálculo da transferência de calor interfacial, que leva em consideração a relação de densidade das fases,

$$Nu = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[1 - \frac{2 + 3\mu_b/\mu_c}{1 + (\rho_b\mu_b/\rho_c\mu_c)^{1/2}} \frac{1,45}{Re^{1/2}} \right]^{1/2} Pe^{1/2} \quad (2.22)$$

em que Pe é o número de Peclet ($Pe = Pr \cdot Re$), uma grandeza adimensional que expressa a razão entre a difusão e convecção de calor. Nesse mesmo trabalho, os autores também propõem correlações para partículas fluidas esferoidais oblatas e no formato de calota esférica, fazendo uso da teoria do escoamento potencial. Para os dois formatos de partícula, a correlação sugere que para $Re \gg 1$ e $Pr > 1$, o número de Nusselt decresce com a deformação. A relação entre as duas correlações, assumindo os formato esférico e distorcidos, é dado pelos fatores geométricos das últimas, sendo ela para o formato esferoidal oblato,

$$\frac{Nu}{Nu_{esf}} = \left(\frac{S_{esfera}}{S} \right) \left[\frac{2}{3} (1 + \kappa_{geo}) \right]^{1/2} \quad (2.23)$$

e para o formato de calota esférica,

$$\frac{Nu}{Nu_{esfera}} = 1,58 \frac{(3E^2 + 4)^{2/3}}{E^2 + 4} \quad (2.24)$$

em que κ_{geo} é um fator geométrico, cujo cálculo pode ser encontrado em Lochiel & Calderbank (1964), E é a excentricidade, S é a área interfacial, S_{esfera} é a área interfacial de uma esfera, e Nu_{esfera} é o valor de Nu calculado pela Equação (2.22).

Winnikow (1967) também propõe, para partículas fluidas esféricas, uma correlação para o cálculo da transferência de calor interfacial. Nesse estudo, as mesmas hipóteses do trabalho de (Lochiel & Calderbank, 1964) são consideradas, porém uma modificação na condição de contorno é introduzida na solução do perfil de velocidades de Chao (1962). Para a situação em que μ_b/μ_c e $\rho_b/\rho_c \ll 1$, situação em que fase contínua

pode ser aproximada como invíscida, a correlação proposta pelos autores é dada por,

$$Nu = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[1 - \frac{2,89}{Re^{1/2}} \right]^{1/2} Pe^{1/2} \quad (2.25)$$

Para essa situação limite, a Equação (2.25) é idêntica a obtida em (Lochiel & Calderbank, 1964) para o formato esférico e de acordo com (Clift *et al.*, 2013), a correlação é válida para $Re > 70$.

Clift *et al.* (2013) expõem correlações para o cálculo da transferência de massa interfacial e utilizam a analogia entre a transferência de calor e massa para o cálculo dos coeficientes das mesmas. Para partículas fluidas esféricas, as correlações encontradas nesse trabalho, são baseadas nas equações de Navier-Stokes para situações limites ($Re \rightarrow 0$ e $Re \rightarrow \infty$), ou soluções numéricas dessas equações baseadas na vorticidade.

Para valores finitos de Re , (Clift *et al.*, 2013) trazem um conjunto de soluções numéricas para as mais variadas hipóteses, dentre elas as utilizadas para as correlações mostradas nas Equações (2.22)–(2.25). Dentro desse grupo, encontra-se também a correlação de LeClair & Hamielec (1971), que utiliza a solução para o campo de velocidades do trabalho de um trabalho anterior (Hamielec *et al.*, 1967), resultando em uma correlação para o número de Nusselt Nu como,

$$Nu = (0,65 + 0,06Re^{1/2}) Pe^{1/2} \quad (2.26)$$

Outra correlação apresentada em Clift *et al.* (2013) é expressa como,

$$Nu = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[1 - \frac{\frac{2+3\kappa}{3(1+2\kappa)}}{\left\{ 1 + \left[\frac{(2+3\kappa)Re^{1/2}}{(1+\kappa)(8,67+6,45\kappa^{0,64})} \right]^n \right\}^{1/n}} \right]^{1/2} \quad (2.27)$$

em que n é:

$$n = \frac{4}{3} + 3\chi \quad (2.28)$$

e χ é a relação de viscosidades ($\chi = \mu_b/\mu_c$).

Oellrich *et al.* (1973), também propôs para condições de Re e Pr finitos, correlações para duas condições limites,

$$Nu = 2,0 + \frac{0,651Pe^{1,72}}{1,0 + Pe^{1,22}} \quad (2.29)$$

para $Re \rightarrow 0$ e $Pr \rightarrow \infty$, e,

$$Nu = 2,0 + \frac{0,232Pe^{1,72}}{1,0 + 0,205Pe^{1,22}} \quad (2.30)$$

para $Re \rightarrow \infty$ e $Pr \rightarrow 0$. Para números de Pe arbitrários, Clift *et al.* (2013) mostra que,

$$Nu = 1 + (1 + 0,564Pe^{2/3})^{3/4} \quad (2.31)$$

É importante mostrar que as correlações propostas mostradas nas Equações (2.29)–(2.31) resultam no valor de $Nu = 2,0$ quando $Re = 0,0$, valor encontrado para a situação de difusão pura, em consequência das mesmas terem sido desenvolvidas com base nesse pressuposto.

Por outro lado, quando $Re \rightarrow \infty$, os efeitos convectivos são dominantes e o escoamento pode ser considerado invíscido e as equações podem ser resolvidas pela teoria do escoamento potencial. Fazendo uso dessas hipóteses, utilizando $Pe \rightarrow \infty$, a correlação de Boussinesq (1905) é,

$$Nu = \frac{2,0}{\sqrt{\pi}} Pe^{1/2} \quad (2.32)$$

Como pode ser observado, algumas das correlações mostradas anteriormente, se aproximam da Equação (2.32) quando $Re \rightarrow \infty$, uma vez que foram baseadas para tender a esse valor nessa condição limite. Esse é o caso das correlações dadas pelas Equações (2.22), (2.23), (2.25) e (2.31).

Em um trabalho mais recente, Takemura & Yabe (1998) realizaram um estudo experimental e numérico do processo de dissolução de uma bolha esférica de gás. A dissolução da bolha de gás no meio contínuo foi capturada através de técnicas avançadas de imagem e a partir desses resultados fez-se possível o cálculo da transferência de massa, uma vez que a bolha de gás diminuía seu volume conforme ascendia na seção de teste. Os fluidos escolhidos para a fase dispersa e contínua foram, respectivamente, oxigênio e óleo de silicone. Diferentes compo-

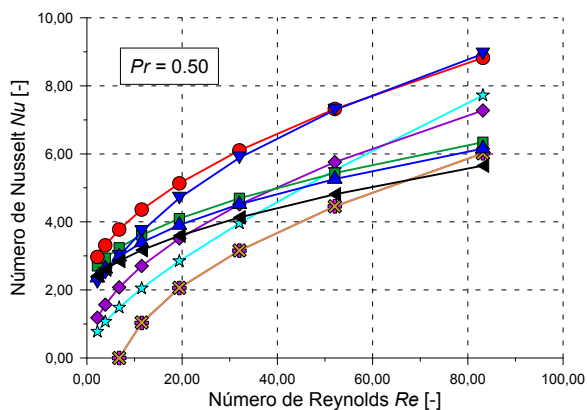
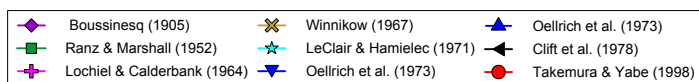
sições foram escolhidas para o óleo de silicone, para assim cobrir um intervalo razoável de Re . Para um ajuste dos valores experimentais, uma análise numérica também foi realizada a partir das solução das equações de Navier-Stokes para a fase contínua, desconsiderando a circulação interna na partícula fluida. De acordo com os autores, os resultados numéricos e experimentais encontram-se em boa concordância. Assim, dos resultados experimentais e do ajuste através das simulações numéricas, os autores propõem uma correlação para o cálculo da transferência de massa interfacial a partir da modificação da Equação (2.27) para $\kappa = 0.0$. A correlação encontrada é expressa por,

$$Nu = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[1 + \frac{2}{3} \frac{1}{(1,0 + 0,09Pe^{2/3})^{3/4}} \right]^{1/2} (2,5 + Pe^{1/2}) \quad (2.33)$$

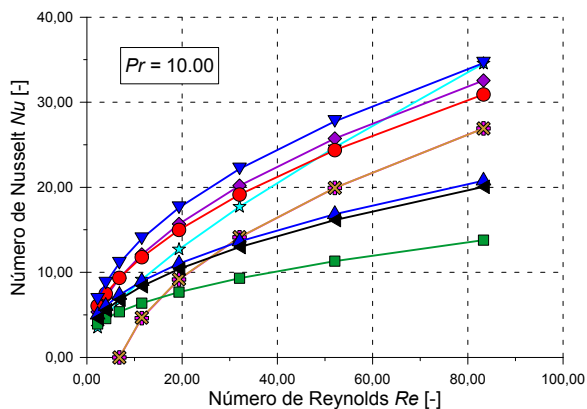
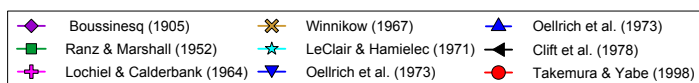
e é válida para $Re < 100$ e $Pe > 1$. Além da correlação ser baseada em resultados experimentais, a mesma tende para $Nu = 2,0$ quando $Re = 0,0$.

A Figura 2.3 mostra o valor de Nu calculados através das diversas correlações expostas nessa seção para diferentes números de Reynolds Re com valor de $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,00$, limites inferior e superior do parâmetro utilizado nesta dissertação.

Figura 2.3 – Valores de Nu calculados através das diversas correlações expostas nessa seção para diferentes números de Reynolds Re com valor de $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,00$



(a) $Pr = 0,50$



(b) $Pr = 10,00$

Da Figura 2.3 se observa que, apesar de da concordância entre as relações de Winnikow (1967) e Lochiel & Calderbank (1964), há uma grande

dispersão entre os resultados para a faixa de Re e Pr a serem estudados nessa dissertação. Nessas curvas também é possível notar que a equação proposta em certos trabalhos não resulta o valor de $Nu = 2,0$ quando $Re = 0,0$, como nas equações propostas por Winnikow (1967), Lochiel & Calderbank (1964), Boussinesq (1905) e (LeClair & Hamielec, 1971). Desse modo, conforme apresentado no Capítulo 4, a comparação entre os resultados obtidos nesse trabalho para partículas fluidas com formato esférico e as correlações encontradas na literatura só são realizadas para aquelas que tendem para $Nu = 2,0$ quando $Re = 0,0$.

A revisão da literatura mostra que grande parte das correlações para a transferência de calor e de massa desenvolvidas até o presente momento desconsideram a deformação das partículas fluidas. Assim, este trabalho busca determinar uma correlação para a transferência de calor e de massa interfacial em partículas fluidas deformadas. Para tanto, é necessária a utilização de um método de captura de interface para a modelagem detalhada do escoamento ao redor das partículas com diferentes morfologias.

METODOLOGIA

Neste capítulo é apresentada a metodologia empregada neste trabalho. A primeira seção é dedicada ao modelo numérico, destacando detalhes das equações governantes a serem resolvidas e da utilização do software comercial ANSYS FLUENT 15.0[®]. Na segunda seção do capítulo, são discutidas as razões da adoção do referencial móvel no sistema de coordenadas e sua implementação numérica. As duas seções subsequentes tratam das metodologias utilizadas no cálculo dos perfis locais da transferência de calor e da transferência de calor global, necessárias na análise local e global da transferência de calor interfacial, respectivamente. Por fim, são apresentados os casos escolhidos para o desenvolvimento das correlações de fechamento para a transferência global de calor e massa.

3.1 Modelo Numérico

Para atingir os objetivos gerais e específicos previamente definidos, fez-se necessário estudar de forma detalhada o escoamento ao redor das partículas fluidas e a transferência de calor entre fase dispersa (partícula fluida) e a fase contínua. Este estudo foi realizado no software comercial de CFD ANSYS FLUENT 15.0[®], que emprega a metodologia de Volumes Finitos, para resolver as equações de conservação que regem o fenômeno. A metodologia, bem como a obtenção das equações governantes, não são discutidas neste trabalho e os detalhes podem ser encon-

trados em Maliska (1994) e ANSYS (2014b). Para o tratamento da interface que separa as duas fases, utilizou-se o método de captura *Volume-of-Fluid* (VOF), uma vez que esse é o modelo mais adequado para a modelagem do escoamento multifásico em questão. Para a reconstrução da interface utilizou-se o método *Piecewise Linear Interface Construction* (PLIC) (Youngs, 1982), que permite uma representação mais detalhada da interface, melhorando também o cálculo dos fluxos entre os volumes de controle da malha computacional. A possibilidade da utilização do PLIC na reconstrução da interface, foi um dos motivos da utilização do ANSYS FLUENT 15.0[®] nessa dissertação, em função do método permitir uma definição mais precisa da interface quando comparado a outros métodos de reconstrução de interface para o VOF. Este método não apenas permite uma melhor definição da posição interface, mas possibilita um cálculo mais suavizado da curvatura da interface, o que impacta de maneira substancial na estabilidade numérica. O cálculo do parâmetro é importante em função de ser utilizado no cálculo da força de tensão superficial, que, nas equações de conservação da quantidade de movimento aparecem como um termo fonte.

As equações de conservação, a serem resolvidas, após a aplicação consistente da formulação média e fazendo uso do modelo homogêneo (Ishii & Hibiki, 2011) são as seguintes:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho_m \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu_m (\nabla \mathbf{u})] + \rho_m \mathbf{g} + \mathbf{S}^\sigma + \mathbf{S}^{mom} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \rho_m C_{p_m} T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u} C_{p_m} T) = \nabla \cdot (k_m \nabla T) + S^{energ} \quad (3.3)$$

em que ρ_m , μ_m , k_m e C_{p_m} são a densidade, viscosidade, coeficiente de condutividade térmica e calor específico da mistura, definidas através da lei de mistura da Equação (2.12), p é a pressão, \mathbf{g} é a aceleração da gravidade, \mathbf{S}^{mom} e S^{energ} são termos fontes nas equações de conservação da quantidade de movimento e de energia e \mathbf{S}^σ é o termo de tensão superficial. A Equação (3.1) é a equação da conservação da massa, a Equação (3.2) é a equação da conservação da quantidade de movimento e a Equação (3.3) é a equação da conservação da energia. Aqui assume-se a hipótese que as duas fases são newtonianas, possuem viscosidade e são incompressíveis. Os escoamentos analisados são modelados como bidi-

mensionais e axissimétricos e considerando o escoamento como laminar, uma vez que este estudo se estende para escoamentos de partículas com número de Reynolds Re de até $Re = 100,0$.

A força de tensão superficial foi incluída através do modelo *Continuum Surface Stress* (CSS) (Lafaurie *et al.*, 1994), já incorporado no pacote de CFD. Este modelo é um método conservativo e faz uso de um tensor tensão $\bar{\bar{\mathbf{T}}}$, que modela a tensão superficial como,

$$\bar{\bar{\mathbf{T}}} = \sigma \left(\bar{\bar{\mathbf{I}}} - \hat{\mathbf{n}} \otimes \hat{\mathbf{n}} \right) |\mathbf{n}| \quad (3.4)$$

em que $\bar{\bar{\mathbf{I}}}$ é o tensor identidade, \mathbf{n} é o gradiente de fração volumétrica e $\hat{\mathbf{n}}$ é seu vetor unitário. Assim, através do tensor tensão $\bar{\bar{\mathbf{T}}}$, a força de tensão superficial é representada como,

$$\mathbf{S}^\sigma = \nabla \cdot \bar{\bar{\mathbf{T}}} \quad (3.5)$$

3.2 Sistema de Coordenadas com Referencial Fixo e Móvel

Para simular uma partícula fluida ascendendo em um meio infinito, duas metodologias foram propostas, uma empregando um sistema de coordenadas com referencial localizado em um ponto fixo da fase contínua e outra com o referencial localizado no centroide da partícula fluida, denominadas aqui de referencial fixo e móvel, respectivamente.

As duas propostas são esquematizadas nas Figuras. 3.1 e 3.2, que mostram o referencial fixo (inercial), centrado em \mathbf{o} e o móvel (não-inercial), centrado no interior da partícula fluida em \mathbf{o}' .

No sistema de coordenadas com referencial fixo, mostrado na Figura 3.1, a partícula fluida é inicialmente definida como uma esfera com diâmetro d_b distante a uma distância C da condição de contorno de saída (*outlet*), essa localizada na fronteira inferior. O processo de solução ocorre até o centroide da partícula fluida atingir uma distância pré-determinada, definida como 90 % do valor da altura D do domínio computacional.

Nesta configuração, em função da região de interesse do estudo aqui apresentado estar localizado nas proximidades da partícula fluida, porém, considerando também a necessidade de um *far-field* de forma que

Figura 3.1 – Esquema do domínio computacional para o sistema de coordenadas com referencial fixo (inercial), mostrando as condições de contorno e iniciais.

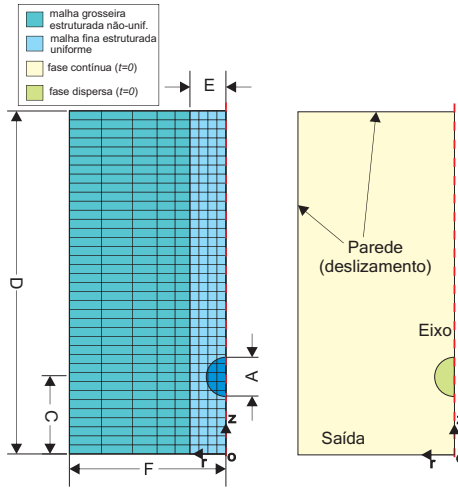
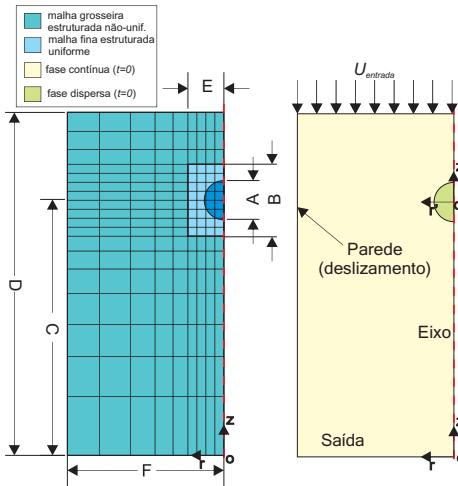


Figura 3.2 – Esquema do domínio computacional para o sistema de coordenadas com referencial móvel (não-inercial), mostrando as condições de contorno e iniciais.



as condições de contorno não afetassem a solução do escoamento nas proximidades da interface, a malha foi subdividida em duas regiões. Na primeira região, delimitada pela condição de contorno de eixo (*axis*) até uma certa distância E , o domínio computacional foi discretizado com uma malha fina, estruturada e uniforme, permitindo um refino adequado nessa região de forma a capturar adequadamente a posição e curvatura da interface, assim como os fenômenos da camada limite nas proximidades da mesma. No restante do domínio computacional, uma malha grosseira, estruturada e não-uniforme foi utilizada. Visando preservar a estabilidade numérica da solução, a transição entre as duas regiões foi realizada de maneira suave. As dimensões da geometria do domínio computacional em função do diâmetro d_b são mostradas na Tabela 3.1, nela é possível observar as dimensões utilizadas para a situação descrita pela Figura 3.1.

Tabela 3.1 – Dimensões da geometria do domínio computacional em função do diâmetro d_b para o referencial fixo mostrando na Figura 3.1.

Dimensão	A	C	D	E	F
Valor	$1,0d_b$	$4,0d_b$	$30,0d_b$	$1,1d_b$	$20,0d_b$

Uma das dificuldades em utilizar o referencial fixo, não-inercial, é a definição da altura D do domínio computacional. Em certas configurações, uma altura elevada (cerca de $30,0d_b$) não permitia o total desenvolvimento hidrodinâmico e/ou térmico do escoamento, sendo necessário aumentar seu valor. Como apresentado nas seções seguintes, para resultados detalhados nas proximidades da interface entre as duas fases, é preciso uma grande quantidade de volumes na região onde a malha é mais fina, elevando de maneira drástica o esforço computacional exigido e diminuindo os intervalos de avanço no tempo em cada passo temporal, uma vez que o conjunto de equação é resolvido de maneira explícita.

Com tal problema em mente, propôs-se a alteração do sistema de coordenadas para o centroide da partícula fluida, movendo-o da posição **o** para **o'**, conforme ilustrado na Figura 3.2, objetivando manter a partícula fluida estacionária na posição o' . Essa alteração, além de eliminar a restrição do tempo de simulação e permitir o pleno desenvolvimento do escoamento, reduziu a região ocupada pela malha fina, estruturada e uniforme. A partir da modificação, essa nova área, mostrada na Figura 3.2,

reduziu-se para um retângulo com dimensões de B por E , envolvendo apenas o domínio computacional próximo e interno a partícula fluida. Na Tabela 3.2 são apresentadas as dimensões da geometria do domínio computacional em função do diâmetro d_b utilizadas nas simulações realizadas para obtenção das curvas de correlação mostradas nesta dissertação.

Tabela 3.2 – Dimensões da geometria do domínio computacional em função do diâmetro d_b para o referencial móvel mostrando na Figura 3.2.

Dimensão	A	B	C	D	E	F
Valor	$1,0d_b$	$1,1d_b$	$20,0d_b$	$40,0d_b$	$1,1d_b$	$20,0d_b$

Através de uma rápida comparação entre as Tabelas 3.1 e 3.2, percebe-se claramente a diminuição da região com alta densidade de volumes computacionais, permitindo um aumento considerável do número de volumes próximos a interface sem prejuízo no custo computacional.

As equações governantes e as condições de contorno e iniciais necessitam ser modificadas no referencial mostrado na Figura 3.2, visto que a partícula fluida deve permanecer estática. Assim, um termo fonte S^{mon} foi adicionado na equação da conservação do movimento na direção axial através de uma UDF (*User Defined Function*), recurso do software de CFD ANSYS FLUENT 15.0[®] que permite a inserção de rotinas computacionais escritas em C no algoritmo de cálculo da solução das equações governantes. Este termo fonte é calculado da seguinte maneira: primeiramente, calcula-se a velocidade média de ascensão da partícula fluida U_b^t em um tempo t , de forma que,

$$U_b^t = \frac{\iiint_{\Omega} \alpha_b u \, dV}{\iiint_{\Omega} \alpha_b \, dV} \quad (3.6)$$

em que Ω é o domínio computacional e u é a componente axial da velocidade da mistura \mathbf{u} . É importante mencionar que os volumes com $0 < \alpha_b \leq 1$ são aqueles que aproximadamente englobam a partícula fluida e que a Equação (3.6) só é calculada após a convergência da solução em um determinado passo de tempo. Desta maneira, a velocidade prescrita na entrada, localizada na condição de contorno superior (ver Figura 3.2) é atualizada a cada passo de tempo, fazendo-a igual ao valor da veloci-

dade média de ascensão da partícula fluida, $U_{entrada} = -U_b^t$. Depois, uma nova velocidade média de ascensão $U_b^{t+\Delta t}$ é calculada nesse novo passo de tempo e a aceleração é então calculada como

$$a_b = \frac{U_b^{t+\Delta t} - U_b^t}{\Delta t} \quad (3.7)$$

Finalmente, o termo fonte introduzido na equação da conservação do movimento na direção axial assume o valor de

$$S^{mon} = -\rho_m a_b \quad (3.8)$$

e a Equação (3.8) é aplicada em todos os volumes do domínio computacional.

Nas simulações numéricas em que o referencial não-inercial foi empregado, a partícula fluida também foi inicialmente definida como uma esfera com diâmetro d_b , porém ela é iniciada a uma distância C da condição de contorno de saída; uma vez que o posicionamento das condições de contorno de saída e entrada, respectivamente localizadas nas fronteiras superior e inferior, não deve afetar o resultado das simulações e sim reproduzir aquelas de um meio infinito. Conforme é apresentado no Capítulo 4, estudos foram realizados para verificar a influência do tamanho do *far-field* no escoamento ao redor das partículas fluidas. Deste modo, as dimensões dadas nas Tabelas 3.1 e 3.2 são aquelas definidas após as realização destas verificações.

3.3 Cálculo dos Perfis Locais da Transferência de Calor Interfacial

Na análise da transferência de calor interfacial, os resultados apresentados nesta dissertação são expressos pelo número de Nusselt (Nu), dado pela Equação (3.9):

$$Nu = \frac{h d_b}{k_c} \quad (3.9)$$

em que h é o coeficiente convectivo de transferência de calor, definido como,

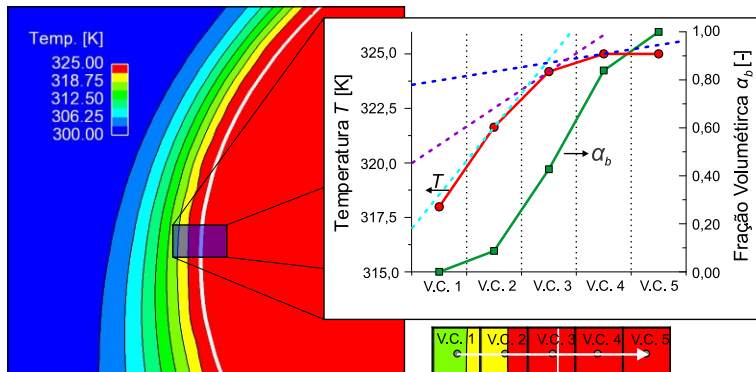
$$h = \frac{-k_c}{\Delta T} \left. \frac{\partial T}{\partial n} \right|_{interface} \quad (3.10)$$

Na Equação (3.10), $\partial T / \partial n = \nabla T \cdot \hat{\mathbf{n}}$ e $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor normal orientado ao sentido externo da interface e ΔT é uma diferença de temperatura entre as fases.

Entretanto, uma das desvantagens dos métodos de captura de interface implícitos, como o VOF, *Level-set* ou CLSVOF (*Coupled Level-Set Volume-of-Fluid* (Sussman & Puckett, 2000)), é que a posição da interface não é exatamente definida, uma vez que a mesma não é calculada explicitamente, mas determinada através do gradiente de uma função escalar de fase ou uma função distância. Apesar do refino da malha computacional levar a uma captura mais precisa da posição da interface, problemas começam a surgir no cálculo explícito dos fluxos de calor interfaciais. Em razão do VOF tratar as duas ou mais fases como um único fluido com propriedades variáveis, os gradientes mais elevados de temperatura e também das propriedades da mistura são encontrados na interface, posto que esses são dependentes da função escalar de fase ou da função distância quando avaliados para a mistura. Consequentemente, o cálculo explícito do coeficiente convectivo de transferência de calor h através da Equação (3.10) e do valor global de Nu através de seu valor médio na interface não é possível de ser realizado. A primeira dificuldade encontra-se na definição exata da posição da interface, pois numericamente ela encontra-se numa região onde há um gradiente da função ou escalar que define as duas ou mais fases.

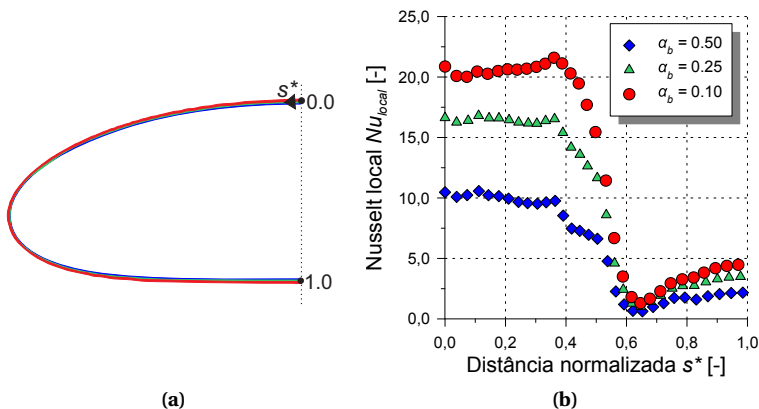
Para ilustrar o problema, a Figura 3.3 mostra o perfil de temperatura e o valor da fração volumétrica α_b ao longo de volumes de controle (V.C.) próximos da interface. A ilustração também mostra a inclinação do perfil de temperaturas em diferentes posições dessa reta, ou seja, o comportamento de $\partial T / \partial n$ para diferentes valores de α_b .

Figura 3.3 – Perfil de temperatura T (—) e o valor da fração volumétrica α_b (—) ao longo de volumes de controle (V.C.) próximos da interface. Em detalhe o comportamento de $\partial T / \partial n$ em diferentes posições (—, —, —, —).



Como pode ser observado da Figura 3.3, quando define-se um valor para a interface, nota-se que existem grandes variações nos perfis locais do fluxo de calor, dependendo do parâmetro definido para sua localização. Essa dependência também é mostrada na Figura 3.4, onde o Nusselt local Nu_{local} é plotado ao longo da coordenada superficial s^* , que é definida como uma posição adimensional ao longo da interface (ver Figura 3.4a).

Figura 3.4 – (a) Interfaces obtidas para as diferentes iso-superfícies de α_b . (b) Perfil do número de Nusselt local Nu_{local} , calculado pela Equação (3.9), para cada posição assumida da interface.



Assim, a partir dos resultados da Figura 3.4, o formato da partícula fluida é muito parecido para os três valores de α_b , Figura 3.4a, e a posição resultante das interfaces encontram-se muito próximas. Contudo, existem diferenças significativas nos perfis de Nusselt local Nu_{local} , Figura 3.4b, especialmente no hemisfério frontal, local onde os fluxos interfaciais de calor são mais elevados.

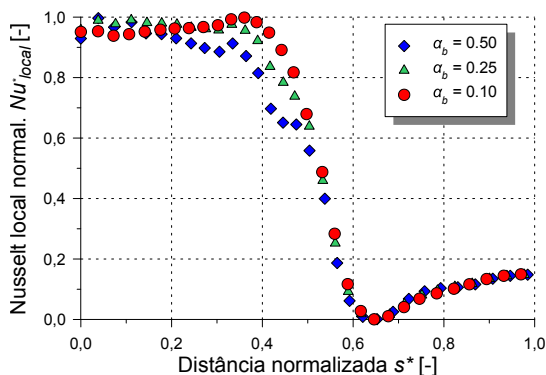
Mesmo em abordagens baseadas em métodos explícitos para captura de interface, como abordagens Lagrangeanas baseadas no método da fronteira imersa (e.g., "*front-tracking method*" (Aboulhasanzadeh *et al.*, 2012)), a determinação do Nu local continua sendo de grande dificuldade. Apesar da posição da interface ser bem definida nesses métodos, e o consequente cálculo das propriedades da mistura ser mais preciso, as equações de transporte continuam sendo solucionadas em um malha fixa (Euleriana) e, novamente, os fluxos na interface não podem ser explicitamente determinados. Além disso, quando utiliza-se a Equação (3.10) para calcular o coeficiente convectivo de transferência de calor, necessita-se uma temperatura de referência na interface, $T_{interface}$. Uma vez que a variação da temperatura próxima da região interfacial é abrupta, essa temperatura $T_{interface}$ não é facilmente definida. Assim, conclui-se desta discussão, que métodos baseados no cálculo de campos escalares e funcionais que possuem uma malha computacional em comum não são capazes de lidar com as grandes variações nas propriedades da mistura e dos gradientes de temperatura próximos a interface, parâmetros fundamentais para o cálculo explícito dos fluxos interfaciais. A única abordagem que permite tais cálculos explícitos é aquela baseada nos métodos com malhas que se ajustam a interface (malhas coincidentes com a interface, *surface fitted methods*), uma vez que os cálculos dos fluxos de calor são realizados na face dos volumes de controle, considerando as variações abruptas das propriedades e dos gradientes de temperatura.

Por outro lado, apesar dos valores dos perfis de Nu_{local} possuírem valores diferentes para cada posição da interface, eles apresentam tendências similares, cuja análise pode ser útil para entender melhor os fenômenos locais de transferência, mesmo que de forma qualitativa. Com o objetivo de observar essa tendência, os perfis de Nu_{local} dados na Figura 3.4b foram normalizados pela Equação (3.11),

$$Nu_{local}^* = \frac{Nu_{local} - Nu_{local}^{min}}{Nu_{local}^{max} - Nu_{local}^{min}} \quad (3.11)$$

em que os subscritos *local*, *min* e *max* representam o valor local e os valores mínimos e máximos locais, respectivamente. A Figura 3.5 ilustra esses perfis normalizados ao longo das três posições assumidas da interface.

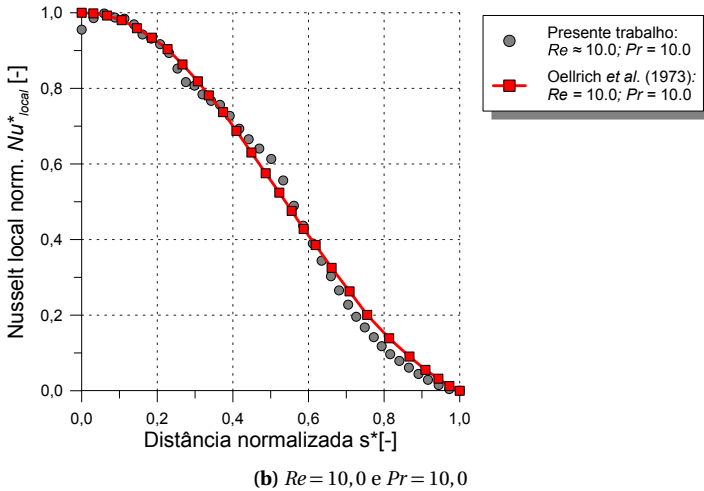
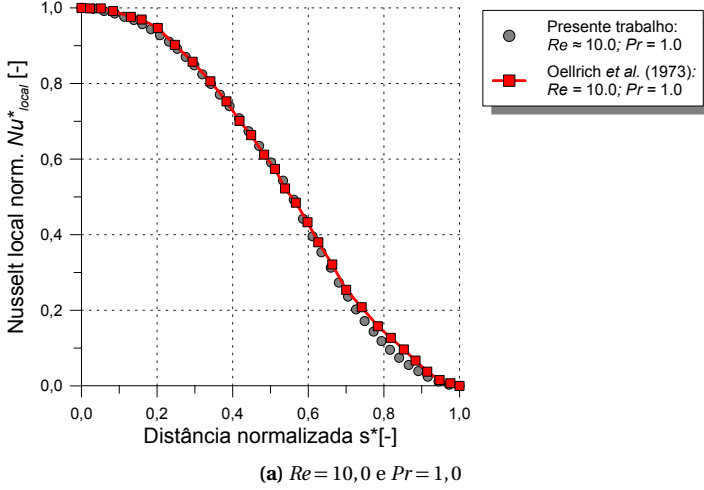
Figura 3.5 – Perfil do número de Nusselt local normalizado Nu_{local}^* , dado pela Equação (3.11), para cada posição assumida da interface.



Assim, é esperado que assumindo-se os mesmos valores de α_b na definição da interface, em diferentes casos, perfis normalizados como os mostrados na Figura 3.5 possam ser analisados para fins comparativos. Baseando-se nesse princípio, os perfis de Nu_{local}^* foram utilizados na análise local do processo de transferência de calor interfacial, correlacionando-os com a estrutura do escoamento local. Esse tipo de análise é importante para a compreensão de fenômenos relacionados ao padrão do escoamento local, como por exemplo, o ponto de separação da camada limite, na porção traseira da partícula fluida. Além do mais, é de fundamental importância para a fundamentação das conclusões acerca dos resultados globais.

Como forma de verificar se os perfis Nu_{local}^* obtidos através da definição de uma posição da interface conseguiam representar qualitativamente a transferência de calor local na interface, fez-se uma comparação dos valores através da normalização dos perfis encontrados por Oellrich *et al.* (1973) ao redor de uma partícula fluida esférica, como visto na Figura 3.6.

Figura 3.6 – Comparação entre os perfis de Nu_{local}^* obtidos neste trabalho e os resultados de Oellrich *et al.* (1973) para $Re = 10,0$ em diferentes números de Pr .



A comparação dos perfis de Nu_{local}^* ao longo da interface apresentada na Figura 3.6 mostra uma boa concordância entre os resultados, especialmente para a situação em que $Re = 10,0$ e $Pr = 1,0$. Para o caso em que o número de Pr é mais elevado, $Re = 10,0$ e $Pr = 10,0$, devido as considerações numéricas citadas acima, há certa dificuldade no cálculo

dos fluxos de calor interfaciais na porção frontal da partículas ($0, 0 \leq s^* \leq 0, 50$). Entretanto, uma análise qualitativa pode ser realizada, permitindo o relacionamento da transferência de calor local e o padrão do escoamento ao redor da partícula fluida.

3.4 Cálculo da Transferência de Calor Interfacial

Visando contornar os problemas inerentes à definição de uma posição da interface a partir de uma iso-superfície de α_b , descritos na seção anterior, define-se aqui uma forma alternativa para o cálculo da transferência de calor interfacial global. Para tal, o número de Nusselt Nu_{global} , referenciado a partir de agora como Nu_{global} , foi obtido a partir de um balanço de energia global. A temperatura da partícula foi mantida constante através da inclusão de um termo fonte S^{energ} na equação da conservação da energia para a mistura, Equação (3.3), resultando em $T_{interface} = T_b$. O termo fonte foi definido como igual ao calor total transferido no passo de tempo anterior, da partícula para a fase contínua, cujo valor é igual ao termo transiente de acumulação da equação da conservação da energia. Assim, o valor do termo S^{energ} adicionado na equação da conservação da energia é calculado como,

$$S^{energ} = \alpha_b \rho_b C_{p_b} \frac{(T_b - T^{t-\Delta t})}{\Delta t} \quad (3.12)$$

em que T_b é a temperatura da partícula fluida no início de cada simulação e definida como condição inicial e $T^{t-\Delta t}$ é a temperatura no passo de tempo anterior. O termo α_b na Equação (3.12) assegura que o termo fonte S^{energ} apenas é incluído na equação da conservação na região do domínio computacional ocupado pela partícula fluida, lembrando que o valor de α_b possui valor $0 < \alpha_b < 1$ internamente e $\alpha_b = 0.0$ fora dela.

Com o auxílio desse termo fonte na equação da conservação da energia, a temperatura da partícula fluida T_b é mantida constante durante toda a simulação. Desta forma, a temperatura de referência ($\Delta T = T_b - T_c$) é simplesmente definida como a diferença entre a temperatura da partícula fluida T_b e a temperatura da fase líquida em um local afastado da interface T_c , sendo essa última igual a temperatura inicial da fase líquida.

Por meio de um balanço de energia, utilizando um volume de controle grande o bastante para envolver a partícula fluida, foi possível cal-

cular a transferência de calor interfacial total $Q_{interfacial}$ entre a partícula e a fase contínua. Uma vez que o termo fonte da Equação (3.12) representa a quantidade exata de calor a ser transferida para manter a temperatura da partícula fluida constante, quando integrado no volume no volume de controle, pode ser considerada como a transferência de calor total entre as duas fases. Assim, a transferência de calor total é calculada como,

$$Q_{interfacial} = \int_{V.C.} S^{energ} dV \quad (3.13)$$

e o número de Nusselt global Nu_{global} ,

$$Nu_{global} = \frac{Q_{interfacial} d_b}{S_{interface} k_c (T_b - T_c)} \quad (3.14)$$

em que $S_{interface}$ é a área interfacial da partícula fluida, definida como a área da iso-superfície de $\alpha_b = 0,50$. Na Equação (3.14), apesar da área interfacial $S_{interface}$ ser calculada a partir de uma definição de uma posição da interface (iso-superfície de α_b), a definição de um valor de α_b pouco afeta a posição da interface e consequentemente sua área interfacial, conforme mostrado na Figura 3.4a. Assim, pode-se considerar que o número de Nusselt calculado pela Equação (3.14) é independente da forma como é definida a posição da interface.

3.5 Planejamento Numérico

Para estudar o efeito do formato de uma partícula fluida na transferência de calor interfacial, diversos casos foram simulados para diferentes valores de números de Eötvös (EO) e Reynolds (Re). Desta forma, com tal objetivo em mente, simulou-se a situação de uma bolha ascendendo em um meio infinito, em que as propriedades dos fluidos e o diâmetro inicial da partícula fluida foram definidos de acordo com a correlação gráfica generalizada mostrada em (Clift *et al.* (2013), p. 27). A partir desse gráfico, o formato e a velocidade terminal (que define o Re) das partículas fluidas podem ser estimados pelo uso de três números adimensionais, Reynolds (Re), Eötvös (EO) e Morton (Mo), definidos como,

$$Re = \frac{\rho_c U_t d_b}{\mu_c} \quad (3.15)$$

$$Eo = \frac{g(\rho_c - \rho_b)d_b}{\sigma/d_b} \quad (3.16)$$

$$Mo = \frac{g\mu_c^4(\rho_c - \rho_b)}{\rho_c^2\sigma^3} \quad (3.17)$$

em que U_t é a velocidade terminal, $|\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_b| = U_t$ na Equação (2.16), e d_b é o diâmetro da partícula fluida baseado no volume de uma esfera, calculado como,

$$d_b = \sqrt[3]{\frac{6V_{esfera}}{\pi}} \quad (3.18)$$

Em função da deformação das partículas fluidas, o diâmetro não foi baseado na área superficial das mesmas, pois a análise dos parâmetros adimensionais através dessa abordagem seria trabalhosa, visto que deformações na partícula fluida resultam em mudanças na área superficial. Assim, a definição baseada no volume de uma esfera é mais interessante por resultar em valor constante, independente do nível de deformação. Como visto no Capítulo 5, o efeito da alteração da área superficial foi tratado de maneira isolada e posteriormente introduzido nas correlações de transferência interfacial de calor global.

O número de Eötvös representa a relação entre as forças de empuxo e de tensão superficial, enquanto, o número de Reynolds dá a relação entre o fluxo convectivo e o fluxo difusivo da quantidade de movimento. O significado físico do número de Morton não é tão bem definido na literatura, mas pode ser considerado como uma relação entre as forças viscosas e de tensão superficial. Outra grandeza adimensional importante na análise de partículas é o número de Weber We que relaciona as forças de inércia e tensão superficial, sendo definido como,

$$We = \frac{\rho_c U_t^2 d_b}{\sigma} \quad (3.19)$$

Como apresentado na Equação (3.15), o Re é dependente da velocidade terminal da partícula e não pode ser definido como parâmetro de entrada na simulação. Sendo assim, os números de Eo e Mo são definidos como parâmetros de entrada e o número de Re é definido a partir da velocidade terminal resultante, a qual é resultante do balanço entre as forças de tensão superficial, viscosas e de empuxo. O formato da partícula fluida é predominantemente um produto do balanço entre as forças de

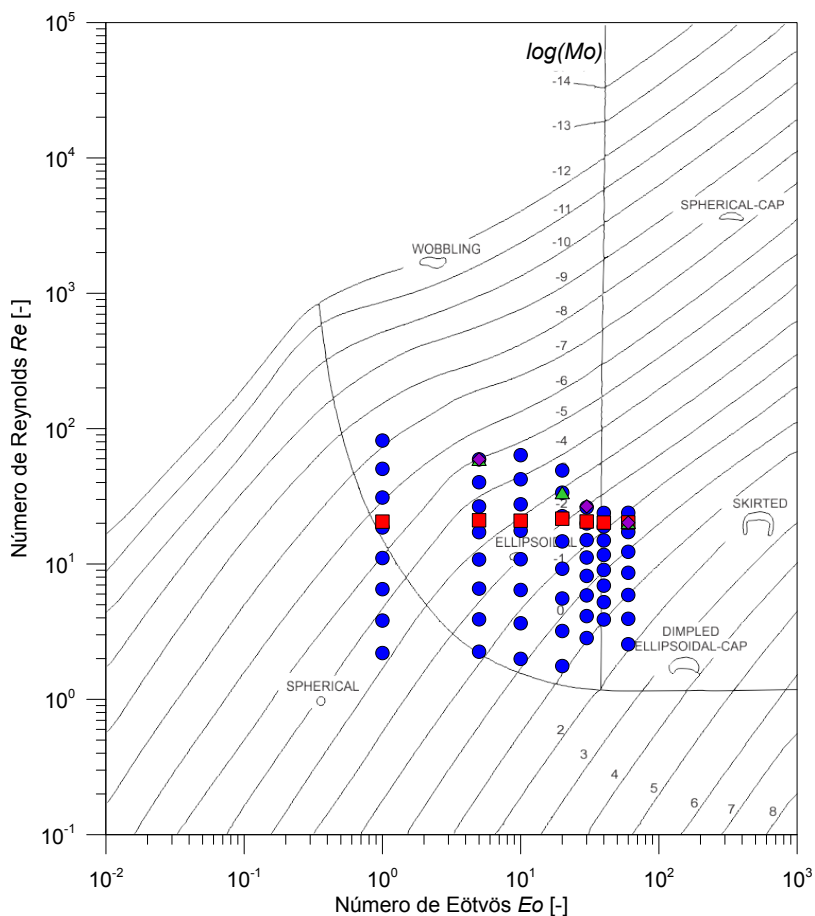
tensão superficial e empuxo, e assim esta intimamente relacionado com Eo (apesar de haver alguma dependência da viscosidade, e logo, de Mo). Dessa forma, em geral, pequenos valores de Eo resultam em partículas esféricas ou quase esféricas, que começam a tornar-se distorcidas conforme aumento do número de Eötvös Eo .

Além das grandezas adimensionais mencionadas acima, também foram utilizadas mais quatro outros números adimensionais característicos, sendo eles as razões de densidade ($\gamma = \rho_b/\rho_c$), de viscosidade ($\chi = \mu_b/\mu_c$), de condutividade térmica ($\beta = k_b/k_c$) e de calores específicos ($\zeta = C_{p_b}/C_{p_c}$).

A abordagem adotada nessa dissertação de mestrado para o desenvolvimento de uma correlação de transferência de calor e massa para partículas fluidas distorcidas, consistiu fundamentalmente em realizar simulações para diversos casos, variando os parâmetros adimensionais característicos Eo e Mo , para capturar o efeito da distorção das partículas nos coeficientes de transferência de calor e massa globais.

Os casos simulados nesse trabalho são mostrados na Figura 3.7 de forma sobreposta a correlação gráfica de Clift *et al.* (2013). Os parâmetros adimensionais foram variados em um certo intervalo, procurando cobrir três regiões distintas da correlação gráfica para diferentes morfologias de partículas: i) esférico; ii) elipsoidal e iii) capa elipsoidal, conforme definido em (Clift *et al.* (2013), p. 27).

Figura 3.7 – Casos simulados nesse trabalho plotados sobre o mapa de regimes morfológicos encontrado em (Clift *et al.* (2013), p. 27).



Fonte: Adaptado de Clift *et al.* (2013)

Nos casos com altos valores de Eo ($Eo > 20$), o valor máximo dos números de Re foi limitado para um valor próximo de 20. Isso porque, nessas situações, a diminuição do número de Mo para obtenção de velocidades terminais U_t mais elevadas, resulta na quebra e coalescências das partículas fluidas ou no "skirting". As duas situações são mostradas nas Figuras 3.8 e 3.9.

Figura 3.8 – Quebra de uma partícula fluida a partir de deformação da cauda. Embora este fenômeno é fisicamente consistente, para essas condições, o método VOF não é capaz de capturá-lo de forma quantitativamente adequada.

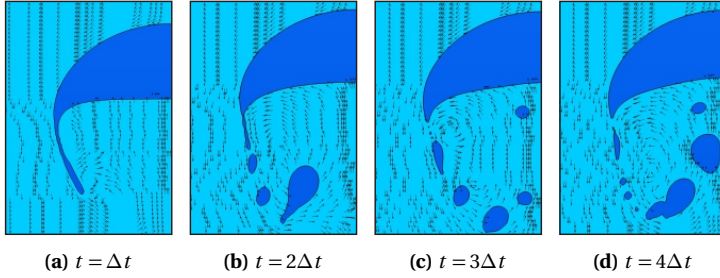
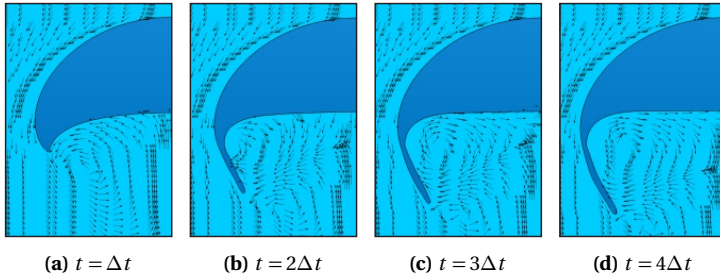


Figura 3.9 – "Skirting", formação da "skirt" (saia, em inglês) na região de recirculação da partícula fluida.



O "skirting" ocorre quando as forças viscosas aumentam e a força de tensão superficial é baixa. Nela, a interface é arrastada para a região de descolamento hidrodinâmico, formando uma "skirt" (saia, em inglês) na região de recirculação da partícula fluida, conforme ilustrado na Figura 3.9.

Apesar dos fenômenos descritos nas Figuras 3.8 e 3.9 representarem uma condição fisicamente consistente para o regime de escoamento, o método VOF não é capaz de adequadamente capturar a quebra e fragmentação da interface em termos quantitativos. Além disso, a aquisição de dados para o desenvolvimento da correlação da transferência de calor e massa, implica em uma variação sistemática de alguns parâmetros do escoamento, deixando outros parâmetros constantes, nesse caso, o volume da partícula, que deve permanecer fixo em todas as simulações.

Assim, na presença de quebra e coalescência e *skirting*, estudos específicos para essas situações devem ser desenvolvidos, incluindo, se possível, o efeito das partículas que se desprendem para posterior coalescência/quebra na estrutura do escoamento e no processo de transferência de calor e massa.

Para cada caso mostrado na Figura 3.7, o número de Prandtl Pr foi variado entre 0.5 e 10.0, com a intenção de avaliar o efeito desse parâmetro no coeficiente de transferência de calor. Simulações foram realizadas para diferentes valores de Pr : i) $Pr = 0.50$; ii) $Pr = 0.75$; iii) $Pr = 1.0$; iv) $Pr = 2.5$; v) $Pr = 5.0$ e; vi) $Pr = 10.0$. Em todos esses casos, necessários para o desenvolvimento da correlação aqui pretendida, as variáveis que dão as razões para as propriedades nas fases dispersa e contínua foram mantidas constantes em todos os casos simulados ($\chi = \beta = \gamma = 0.001$). Como foi mostrado na Seção 3.4, a temperatura da partícula fluida foi mantida constante, uma vez que só há interesse no estudo da transferência de calor no lado da fase contínua. Assim, a razão entre os calores específicos ζ e as condutividades térmica β não influenciam no processo. Apesar disso, com a intenção de aumentar a inércia térmica da partícula fluida, o valor de ζ , razão entre os calores específicos, foi definido como um valor elevado com o intuito de aumentar a estabilidade numérica das simulações.

VERIFICAÇÃO DA METODOLOGIA PROPOSTA

O objetivo deste capítulo é apresentar as análises realizadas para verificar a metodologia empregada nessa dissertação e descrita nos capítulos anteriores. Como enunciado no Capítulo 3, modificações foram introduzidas nas equações governantes hidrodinâmicas, alterando o sistema de coordenadas referencial. Assim, a primeira seção desse capítulo será dedicada à validação dessa alteração no sistema de coordenadas referencial. Na segunda seção é apresentada uma análise geométrica, cujo objetivo é certificar que as condições de contorno estão bem posicionadas, assegurando que os resultados não são influenciados pelos efeitos da parede, e que as condições de contorno de entrada e saída de massa configuram uma condição de "meio infinito". Para verificar a independência da solução em relação ao tamanho de malha, uma seção é dedicada ao efeito do refino de malha, verificando também se as malhas utilizadas são capazes de capturar a camada limite térmica para altos números de *Re* e *Pr*. Ao final, a partir das simulações para partículas fluidas esféricas (e quase esféricas), é apresentada uma comparação entre o coeficiente global de transferência de calor obtido e aquele calculado por correlações consolidadas para partículas esféricas, encontradas na literatura.

4.1 Verificação do Sistema de Coordenadas Referencial

Como forma de verificar a independência dos resultados com o sistema de coordenadas adotado, realizou-se um primeiro estudo que teve como objetivo verificar se as modificações introduzidas nas rotinas de cálculo computacional via UDF foram corretamente implementadas.

Desse modo, foram escolhidos três casos em que o comprimento de desenvolvimento fluidodinâmico e térmico é passível de ser simulado em uma malha com sistema de coordenadas referencial fixo sem elevado custo computacional. O conjunto de casos selecionados para esse estudo, de acordo com os parâmetros mostrados no mapa de regimes (Figura 3.7) e representados por triângulos verdes na ilustração, são as seguintes: i) $Eo = 5,0$ e $\log(Mo) = -5,0$; ii) $Eo = 20,0$ e $\log(Mo) = -2,86$ e iii) $Eo = 60,0$ e $\log(Mo) = -0,71$. Os mesmos foram selecionados por representar diferentes morfologias e possuírem um comprimento de desenvolvimento razoável em conjunto com um Re significativamente elevado. Para a transferência de calor interfacial, o valor de Pr escolhido para a fase contínua foi $Pr = 1,0$.

Nessa verificação, os parâmetros geométricos das malhas computacionais são aqueles mostrados nas Tabelas 3.1 e 3.2. Quanto a discretização espacial da malha numérica, ela pode ser classificada como intermediária, com 100 volumes representando a distância de um diâmetro d_b ($d_b/\Delta l = 100$) na região onde a malha é fina, estruturada e uniforme (ver Figuras 3.1 e 3.2). O valor de $d_b/\Delta l = 100$ foi definido para esse primeiro estudo pelo fato de não representar um custo computacional tão elevado na formulação com sistema de coordenadas referencial fixo, e o mesmo ser capaz de fornecer informações adequadas acerca do escoamento e da transferência de calor. Mais detalhes sobre os parâmetros numéricos e de independência da discretização espacial são discutidos na Seção 4.3.

A comparação entre os dois sistemas de coordenadas referencial se deu por uma abordagem global e outra local. Na abordagem global, foram comparados os parâmetros quantitativos do regime de escoamento, de transferência de calor e da alteração da interface, sendo esses definidos respectivamente pelos valores de Re , Nu e $S_{razão}$. Esse último parâmetro, $S_{razão}$, pode ser interpretado como a relação entre a área interfacial e a

área superficial de uma esfera ($S_{esfera} = \pi d_b^2$) com mesmo volume, dada por,

$$S_{razão} = \frac{S_{interface}}{S_{esfera}} \quad (4.1)$$

Para a comparação local, necessária para observar os efeitos da alteração do sistema de coordenadas nas proximidades da partícula fluida, a análise é realizada através de perfis de velocidade e temperatura em diferentes seções da partícula fluida.

É importante salientar que a metodologia descrita aqui para o cálculo dos parâmetros da comparação global (Re , Nu e $S_{razão}$), foi a mesma adotada no decorrer de todo o trabalho para esses e outros parâmetros globais, uma vez que esses valores são necessários para a formulação das correlações de transferência de calor interfacial propostas no objetivo geral dessa dissertação de mestrado.

As Figuras 4.1 – 4.3 mostram a evolução do número de Re da partícula ao longo do tempo, nas configurações com sistema de coordenadas referencial fixo e móvel ao longo de todo o período de simulação para os valores de $Eo = 5,0$, $Eo = 20,0$ e $Eo = 60,0$, respectivamente.

Figura 4.1 – Re ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 5,0$.

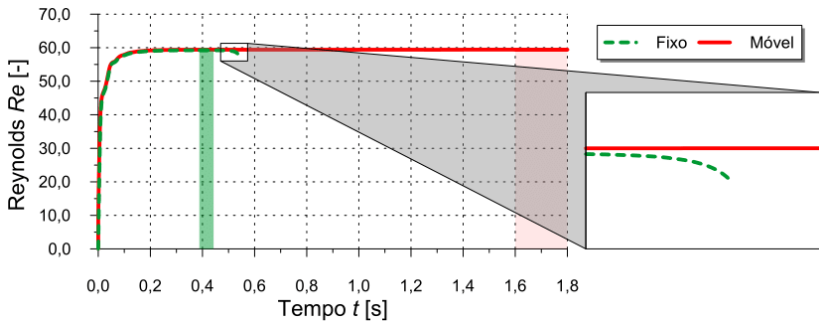


Figura 4.2 – Re ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 20,0$.

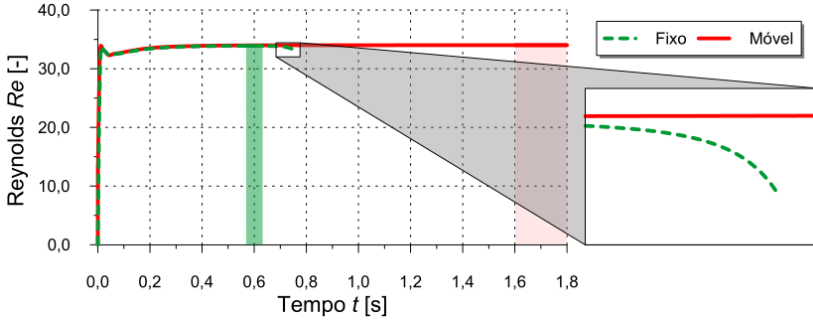
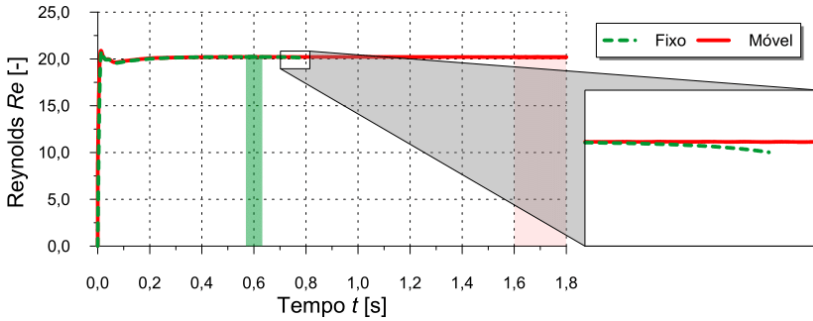


Figura 4.3 – Re ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60,0$.



Nos gráficos, mostra-se no detalhe uma das desvantagens da utilização do referencial fixo, a limitação espacial provocada pela condição de contorno a montante, que delimita a distância percorrida pela partícula fluida. Para essas situações, o critério de parada das simulações numéricas foi definido como o instante de tempo no qual o centro de massa da partícula alcança 90% do domínio computacional. Como mostrado, após determinada distância o escoamento começa a sofrer efeitos dessa condição de contorno, definida aqui como uma parede com deslizamento, alterando significativamente o resultado da simulação. Por outro lado, os resultados obtidos para o novo sistema de coordenadas referencial resultaram em valores muito próximos da abordagem original, eliminando a delimitação física do problema. Assim, foi possível delimitar como critério de parada um instante de tempo adimensional longo o bastante para assegurar o pleno desenvolvimento hidrodinâmico e térmico.

Para o cálculo de Re , bem como os outros parâmetros globais, fez-se uma média no tempo dos valores instantâneos em um janela temporal Δt situada após o alcance do regime permanente, de forma que para uma variável genérica global Θ_{global} :

$$\Theta_{global} = \frac{\int_t^{t+\Delta t} \Theta_{global}^t dt}{\int_t^{t+\Delta t} dt} \quad (4.2)$$

A janela temporal, intervalo de realização da média, é delimitada pelas áreas preenchidas nas Figuras 4.1 – 4.3 e dela pode-se concluir que existe uma certa dificuldade em definir esse intervalo de tempo para a situação inercial, deixando um curto intervalo para realizar a média entre o momento que se atinge o regime desenvolvido e a região influenciada pela fronteira de saída do domínio.

Nas simulações utilizando o sistema de coordenadas referencial móvel, uma janela temporal única foi definida para todos os casos mostrados no mapa de regimes da Figura 3.7, sendo ela definida no intervalo de $1,6s \leq t \leq 1,8s$.

As curvas de $S_{razão}$ ao longo do tempo são mostradas nas Figuras 4.4 – 4.6 para os valores $Eo = 5,0$, $Eo = 20,0$ e $Eo = 60,0$, respectivamente.

Figura 4.4 – $S_{razão}$ ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 5,0$.

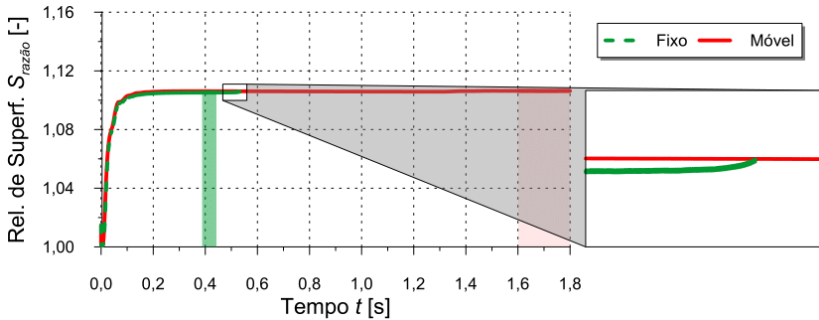


Figura 4.5 – $S_{razão}$ ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 20, 0$.

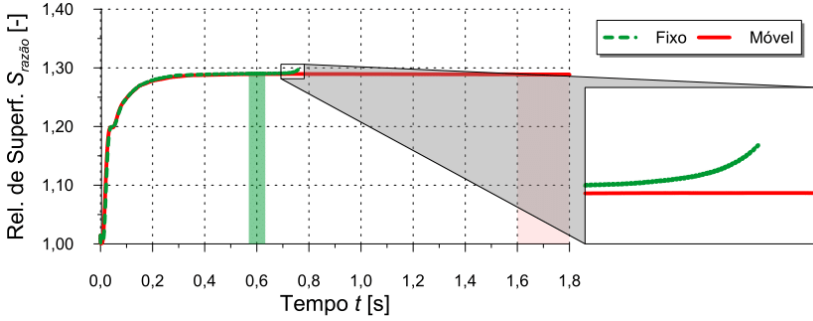
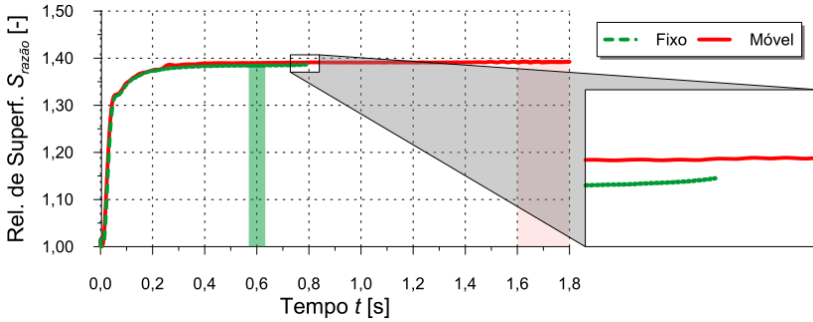


Figura 4.6 – $S_{razão}$ ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60, 0$.



Conforme ilustrado nas Figuras 4.4 – 4.6, os mesmos problemas decorrentes da limitação espacial também são facilmente observados nas curvas transientes e destacadas nas ilustrações. Novamente, os valores obtidos com os dois sistemas de coordenadas referenciais são muito próximos, indicando que o aumento da área superficial nas duas situações é idêntico, justificando o uso da formulação com sistema de coordenadas referencial móvel em função de todas as vantagens já discutidas.

Nas Figuras 4.7 – 4.9 são dadas as curvas transientes de Nu_{global} para os diferentes Eo utilizados na comparação entre os sistemas de coordenada referencial.

Figura 4.7 – Nu_{global} ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 5, 0$.

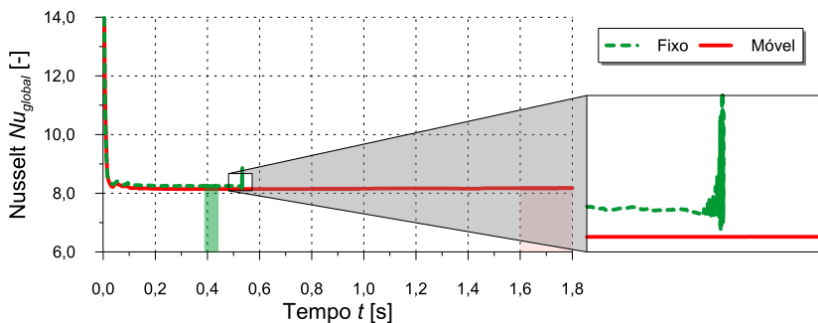


Figura 4.8 – Nu_{global} ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 20, 0$.

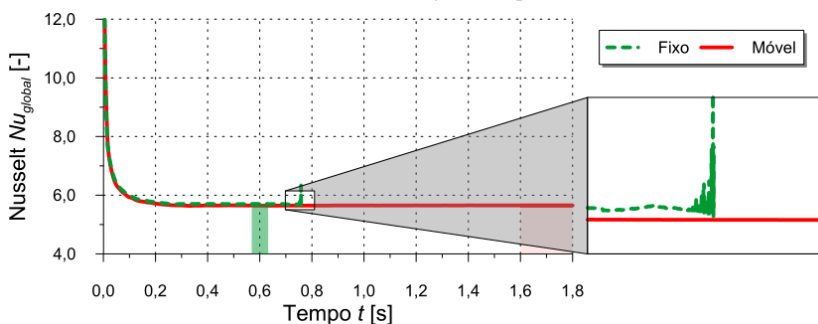
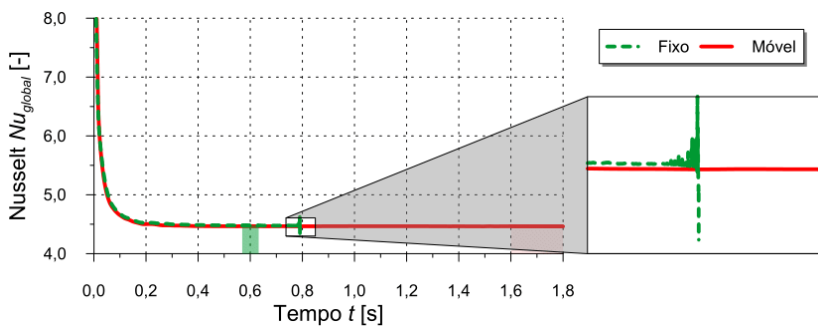


Figura 4.9 – Nu_{global} ao longo do tempo para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60, 0$.



As curvas de Nu_{global} ao longo de tempo para o sistema de coordenadas referencial fixo mostram um comportamento errático nos instantes

finais, com oscilações e um aumento repentino no valor de Nu_{global} em função da condição de contorno a montante que delimita espacialmente o "meio infinito". Quando as curvas para as duas abordagens são comparadas, observa-se que os resultados são próximos. Uma observação interessante é o fato de que conforme a diminuição do Re – para as situações mostradas nas Figuras 4.4 até 4.6, e um aumento de Eo – os valores de Nu_{global} começam a apresentar uma menor diferença. A explicação para tal, de acordo com o autor, é o fato do pleno desenvolvimento térmico não ter sido alcançado para o referencial fixo nas situações de $Eo = 5,0$ e $Eo = 20,0$.

Com o objetivo de resumir as informações mostradas nas Figuras 4.1 – 4.9, a Tabela 4.1 mostra os valores globais de Re , Nu_{global} e $S_{razão}$, calculados pela Equação (4.2) para todas as situações mostradas e a diferença percentual desses valores com base no resultado do sistema de coordenada referencial fixo, *i.e.*:

$$\Theta_{global}^{dif} = 100,0\% \frac{(\Theta_{global}^{fixo} - \Theta_{global}^{movel})}{\Theta_{global}^{fixo}} \quad (4.3)$$

Tabela 4.1 – Resumo da comparação entre os dois sistemas de coordenada referencial estudados.

Eo	Sist. Coord.	Re	Nu	$S_{razão}$	$Re^{dif}[\%]$	$Nu_{global}^{dif}[\%]$	$S_{razão}^{dif}[\%]$
5,0	Fixo	59,25	8,26	1,11	0,30	-1,03	0,09
	Móvel	59,43	8,17	1,11			
20,0	Fixo	33,90	5,69	1,29	0,32	-0,74	-0,08
	Móvel	34,01	5,65	1,29			
60,0	Fixo	20,22	4,48	1,38	-0,10	-0,36	0,58
	Móvel	20,20	4,46	1,39			

Dos resultados da Tabela 4.1 conclui-se que a modificação inserida via UDF nas equações governantes, que visa a alteração do sistema de coordenadas referencial, não afeta o cálculo dos parâmetros globais de interesse e possibilita realizar a simulação de uma partícula fluida ascendendo em um meio infinito.

Entretanto, como forma de verificar o efeito dessas modificações nos perfis locais das variáveis de interesse, uma verificação destes perfis é realizada nos casos previamente escolhidos e discutidos. A comparação se deu pela análise dos perfis normalizados de temperatura T^* e de ve-

locidade axial u^* , calculados através do operador de normalização Θ_{local}^* definido na Equação (4.4):

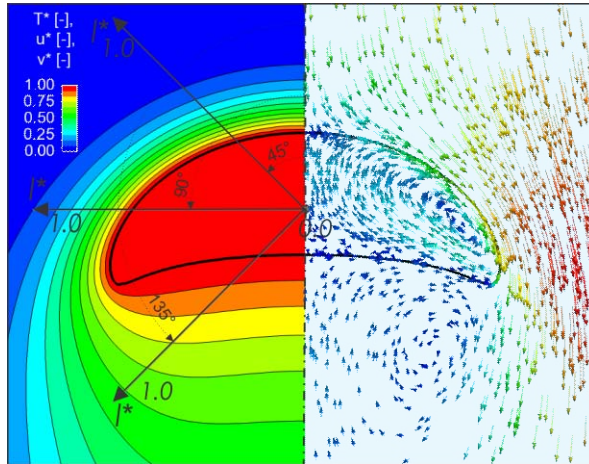
$$\Theta_{local}^* = \frac{\Theta_{local} - \Theta_{local}^{min}}{\Theta_{local}^{max} - \Theta_{local}^{min}} \quad (4.4)$$

Os perfis das variáveis de interesse, são comparados ao longo de três direções l^* espaçadas em 45° , como visto na Figura 4.10. A distância l^* é um comprimento normalizado, conforme a Equação (4.5):

$$l^* = \frac{l}{d_b} \quad (4.5)$$

em que l é o comprimento da reta mostrada na Figura 4.10.

Figura 4.10 – Esquema da comparação local realizada para comparação dos resultados das diferentes abordagens do sistema de coordenada referencial, mostrando em detalhe a localização das direções de l^* .¹



É importante destacar que a análise comparativa realizada aqui tem como principal e único objetivo mostrar que a introdução de modificações nas condições de contorno e equações governantes não comprometem a acuidade dos resultados. A análise detalhada dos perfis locais da solução fluidodinâmica e térmica é mostrada no Capítulo 5.

¹O campo escalar de temperatura e vetorial de velocidade mostrado é para situação em que $Eo = 60.0$.

O perfil de velocidades u^* para os diferentes valores de Eo ao longo das três direções da reta l^* são mostrados nas Figuras 4.11 – 4.13.

Figura 4.11 – Perfil de velocidades u^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 5,0$.

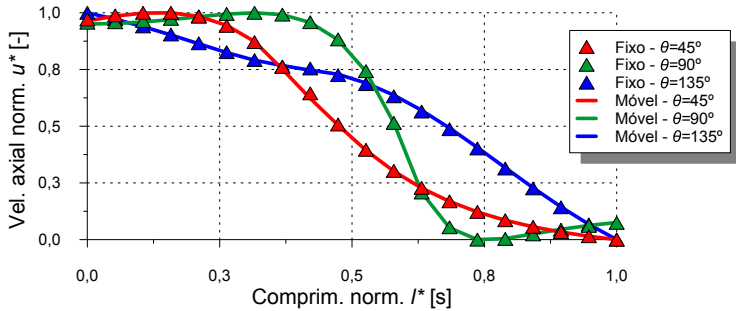


Figura 4.12 – Perfil de velocidades u^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 20,0$.

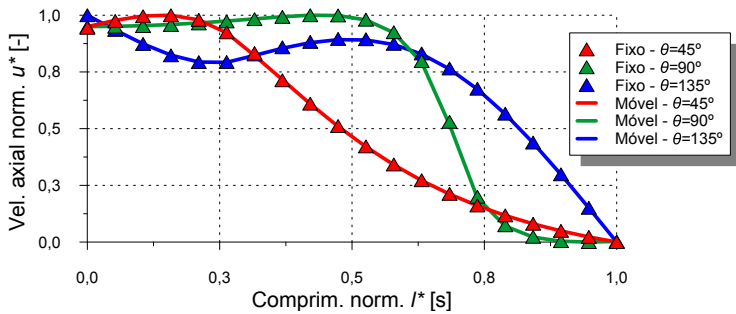
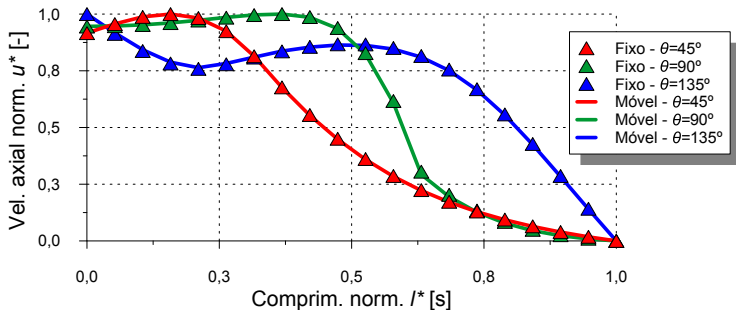


Figura 4.13 – Perfil de velocidades u^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60,0$.



Das Figuras 4.11 – 4.13, conclui-se que as modificações introduzidas

pela UDF nas equações governantes e condições de contorno não afetam o resultado hidrodinâmico.

Para a comparação dos resultados térmico das duas formulações do sistema de coordenadas referencial, as Figuras 4.14 – 4.16 apresentam o perfil de T^* para os diferentes valores de Eu nas três direções da reta de comprimento l . Nessas ilustrações, verifica-se de maneira bastante clara a região entre as fases dispersa e contínua, onde a primeira mantém-se a uma temperatura constante de $T^* = 1,0$ e na outra há um decaimento dessa curva até o limite $T^* = 0,0$, *i.e.*, equilíbrio com o ambiente.

Figura 4.14 – Perfil de temperaturas T^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eu = 5,0$.

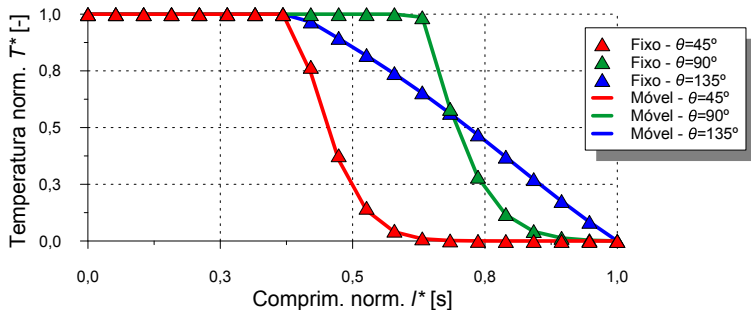


Figura 4.15 – Perfil de temperaturas T^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eu = 20,0$.

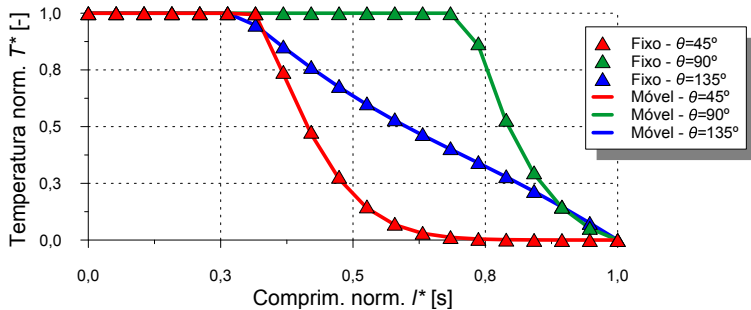
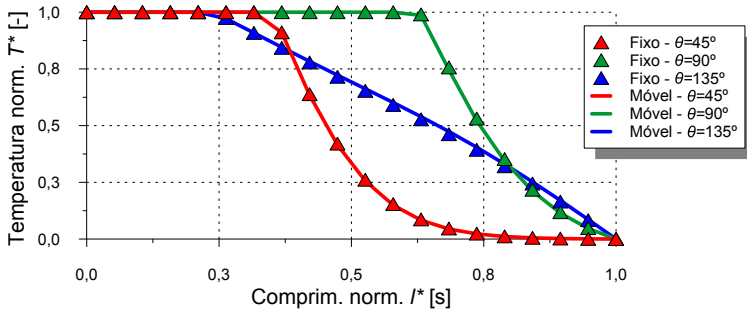


Figura 4.16 – Perfil de temperaturas T^* para os dois sistemas de coordenadas referencial na situação em que $Eo = 60,0$.



Conforme verificado pelas Figuras 4.14 – 4.16, há excelente concordância entre os resultados em todas as direções para os diferentes números de Eo . As curvas mostradas nessas ilustrações refletem que não há modificações significativas na solução da equação da conservação da energia resultantes da troca do sistema de coordenadas referencial.

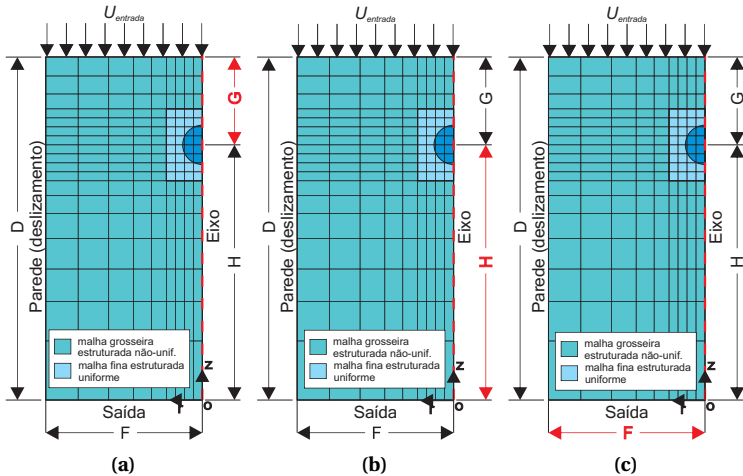
Dos resultados mostrado até agora, conclui-se que a modificação do sistema de coordenada referencial fixo para o móvel é a escolha mais coerente para a solução das equações governantes que regem o problema, devido ao fato dessa última melhor representar uma bolha ascendendo em um meio infinito e induzir uma redução considerável no esforço computacional requerido para resolver o sistema de equações resultante, sem provocar alterações nos resultados globais das variáveis de interesse e nos perfis locais de velocidade e temperatura. Assim, baseando-se nas discussões desta seção, o sistema de coordenadas referencial móvel será adotado ao longo deste trabalho.

4.2 Verificação da Posição das Condições de Contorno

Na seção anterior, diversos aspectos foram analisados visando estudar o impacto da modificação do sistema de coordenadas referencial, mostrando que a utilização de um sistema de coordenadas móvel, com referencial localizado no centro de massa da partícula fluida, é a escolha mais adequada para a solução do problema aqui descrito. Esta seção tem por finalidade estudar o efeito da posição das condições de contorno na

solução final e definir o conjunto de parâmetros geométricos que melhor representa a situação de uma partícula fluida ascendendo em um meio infinito, livre dos efeitos de parede e das condições de contorno de entrada e saída de massa. Assim, tomando como base a Figura 3.2, mantendo as dimensões A , B e E constantes, um estudo foi conduzido a partir da modificação dos parâmetros destacados nas Figura 4.17 (G , H e F), resultando nas configurações mostradas na Tabela 4.2. Como visto na Tabela 4.2, apenas o parâmetro geométrico de interesse foi alterado enquanto que os demais mantiveram-se constantes, possibilitando assim o estudo paramétrico. É importante lembrar que utiliza-se uma condição de axissimetria. Assim, por exemplo, quando $F = 2,0 d_b$, a largura F do domínio computacional será de 4 vezes o raio inicial da partícula fluida.

Figura 4.17 – Parâmetros geométricos utilizados no estudos paramétricos: a) da posição G da condição de contorno de entrada; b) da posição H da condição de contorno de saída e c) da posição F da condição de contorno de parede.



O estudo paramétrico, com as dimensões mostradas na Figura 4.17 e Tabela 4.2, foi realizado para os seguintes casos: i) $Eo = 5,0$ e $\log(Mo) = -5,0$; ii) $Eo = 30,0$ e $\log(Mo) = -2,0$ e iii) $Eo = 60,0$ e $\log(Mo) = -0,71$. Para melhor visualização dos casos escolhidos, eles estão representados por losangos roxos na Figura 3.7. As simulações foram realizadas para um valor de $Pr = 1,0$ na fase contínua. A malha numérica, assim como na Seção 4.1, possui resolução espacial, na região onde a malha é refinada e

Tabela 4.2 – Dimensão dos parâmetros geométricos ilustrados na Figura 4.17 para cada estudo paramétrico em função do diâmetro inicial da partícula fluida d_b .

Estudo Paramétrico	F	G	H	D
C. C. Parede	20d_b	20d _b	20d _b	40d _b
	10d_b	20d _b	20d _b	40d _b
	4d_b	20d _b	20d _b	40d _b
	2d_b	20d _b	20d _b	40d _b
C. C. Entrada	20d _b	20d_b	20d _b	40d _b
	20d _b	10d_b	20d _b	30d _b
	20d _b	8d_b	20d _b	28d _b
	20d _b	4d_b	20d _b	24d _b
C. C. Saída	20d _b	20d _b	20d_b	40d _b
	20d _b	20d _b	10d_b	30d _b
	20d _b	20d _b	8d_b	28d _b
	20d _b	20d _b	4d_b	24d _b

estruturada, de $d_b/\Delta l = 100$, valor considerado adequado para o estudo paramétrico da localização das condições de contorno. Os resultados para as diferentes configurações foram analisados através dos parâmetros globais Re , Nu e $S_{razão}$.

As Figuras 4.18 – 4.20 mostram os valores de Re obtidos para as diferentes distâncias F , G e H nos diferentes padrões de morfologia.

Figura 4.18 – Comportamento dos valores de Re obtidos para as diferentes distâncias F , G e H com $Eu = 5,0$.

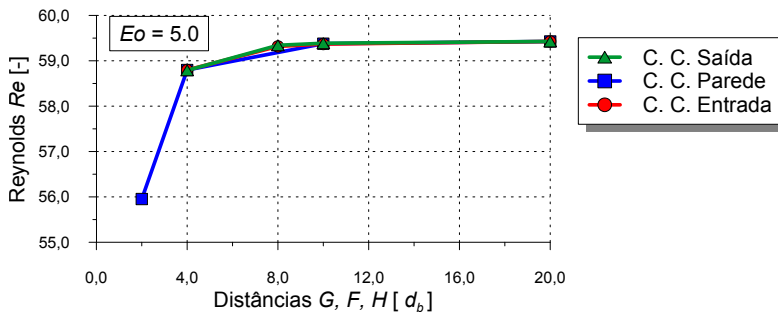


Figura 4.19 – Comportamento dos valores de Re obtidos para as diferentes distâncias F , G e H com $Eu = 30,0$.

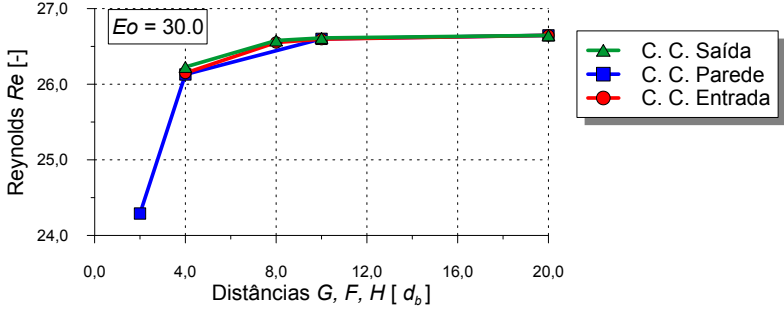
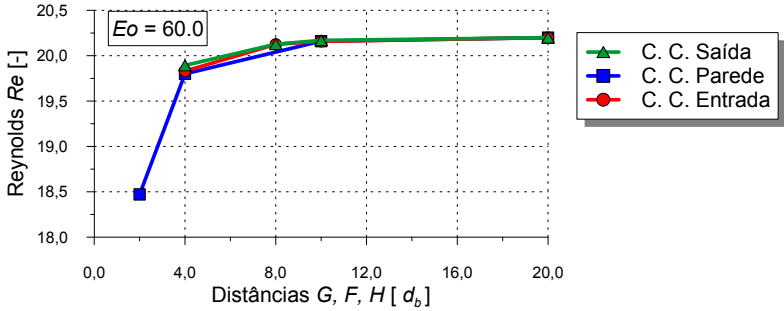


Figura 4.20 – Comportamento dos valores de Re obtidos para as diferentes distâncias F , G e H com $Eu = 60,0$.



Dos resultados mostrados nas Figuras 4.18 – 4.20, percebe-se que o posicionamento das condições de contorno afeta o escoamento e a sua correta colocação é um parâmetro importante, particularmente, em relação a largura do domínio, definido aqui pelo parâmetro F . Como visto nessas curvas, a configuração com $F = 20d_b$, $G = 20d_b$ e $H = 20d_b$ é a ideal para a situação a ser estudada nesse trabalho.

As curvas de Nu e $S_{razão}$ não são mostradas, visto que não há variação significativa desses valores para as diferentes configurações propostas. Entretanto, um resumo dos valores obtidos nos três estudos paramétricos é mostrado nas Tabelas 4.3 – 4.5. Nelas, os valores com sobrescrito *dif* foram calculados para um valor genérico Θ como:

$$\Theta^{dif} = 100,0\% \frac{(\Theta^{FG,H} - \Theta^{FG,H=20,0d_b})}{\Theta^{FG,H=20,0d_b}} \quad (4.6)$$

Tabela 4.3 – Resumo dos parâmetros globais obtidos no estudo paramétrico do posicionamento da condição de contorno de entrada, parâmetro G da Figura 4.17, para os diferentes Eo simulados.

Eo	G	$S_{razão}$	Re	Nu	$S_{razão}^{dif}$ [%]	Re^{dif} [%]	Nu_{global}^{dif} [%]
5,0	4,0 d_b	1,11	58,80	8,17	0,00	-1,06	0,00
	8,0 d_b	1,11	59,32	8,17	0,00	-0,18	0,00
	10,0 d_b	1,11	59,37	8,17	0,00	-0,10	0,00
	20,0 d_b	1,11	59,43	8,17	—	—	—
30,0	4,0 d_b	1,31	26,15	5,10	0,08	-1,87	-0,06
	8,0 d_b	1,31	26,55	5,10	0,08	-0,35	-0,02
	10,0 d_b	1,30	26,60	5,10	0,00	-0,19	0,00
	20,0 d_b	1,30	26,65	5,10	—	—	—
60,0	4,0 d_b	1,39	19,83	4,46	0,07	-1,83	-0,07
	8,0 d_b	1,39	20,13	4,46	0,07	-0,37	-0,04
	10,0 d_b	1,39	20,16	4,46	0,07	-0,20	-0,04
	20,0 d_b	1,39	20,20	4,47	—	—	—

Tabela 4.4 – Resumo dos parâmetros globais obtidos no estudo paramétrico do posicionamento da condição de contorno de parede, parâmetro F da Figura 4.17, para os diferentes Eo simulados.

Eo	F	$S_{razão}$	Re	Nu	$S_{razão}^{dif}$ [%]	Re^{dif} [%]	Nu_{global}^{dif} [%]
5,0	2,0 d_b	1,10	55,95	8,19	-0,36	-5,84	0,18
	4,0 d_b	1,11	58,80	8,17	0,00	-1,06	-0,09
	10,0 d_b	1,11	59,38	8,17	0,00	-0,08	0,00
	20,0 d_b	1,11	59,43	8,17	—	—	—
30,0	2,0 d_b	1,28	24,29	5,19	-2,15	-8,84	1,72
	4,0 d_b	1,30	26,13	5,12	-0,23	-1,94	0,37
	10,0 d_b	1,30	26,60	5,11	0,00	-0,17	0,02
	20,0 d_b	1,30	26,65	5,10	—	—	—
60,0	2,0 d_b	1,36	18,47	4,53	-2,23	-8,55	1,50
	4,0 d_b	1,39	19,80	4,47	-0,07	-1,98	0,13
	10,0 d_b	1,39	20,16	4,47	0,07	-0,19	-0,02
	20,0 d_b	1,39	20,20	4,47	—	—	—

Tabela 4.5 – Resumo dos parâmetros globais obtidos no estudo paramétrico do posicionamento da condição de contorno de saída, parâmetro H da Figura 4.17, para os diferentes Eo simulados.

Eo	H	$S_{razão}$	Re	Nu	$S_{razão}^{dif} [\%]$	$Re^{dif} [\%]$	$Nu_{global}^{dif} [\%]$
5,0	4,0 d_b	1,11	58,79	8,17	-0,09	-1,07	-0,07
	8,0 d_b	1,11	59,34	8,16	0,00	-0,14	-0,13
	10,0 d_b	1,11	59,39	8,17	0,00	-0,07	0,00
	20,0 d_b	1,11	59,43	8,17	—	—	—
30,0	4,0 d_b	1,30	26,23	5,13	-0,61	-1,57	0,53
	8,0 d_b	1,30	26,58	5,11	-0,08	-0,26	0,10
	10,0 d_b	1,30	26,61	5,11	0,00	-0,13	0,04
	20,0 d_b	1,30	26,65	5,10	—	—	—
60,0	4,0 d_b	1,38	19,89	4,47	-0,58	-1,51	0,04
	8,0 d_b	1,39	20,13	4,46	0,22	-0,36	-0,13
	10,0 d_b	1,39	20,17	4,47	0,00	-0,15	0,00
	20,0 d_b	1,39	20,20	4,47	—	—	—

4.3 Estudo de Independência de Malha

Um estudo de convergência de malha foi desenvolvido para assegurar que o resultado das simulações era independente da resolução espacial da malha numérica e verificar se a mesma é capaz de adequadamente capturar a camada limite térmica na superfície de partícula fluida.

Assim, esse estudo foi realizado a partir da simulação, em diferentes resoluções de malha, dos casos com menor valor de Mo para diferentes Eo , situação que resulta nos valores de Re mais elevados para um dado Eo , e com $Pr = 10,0$, maior valor desse parâmetro estudado nesse trabalho. A combinação de elevados números de Reynolds Re e Prandtl Pr , resultam em casos com as camadas limites térmicas mais finas dentre os casos estudados. O parâmetro a ser analisado como critério de convergência nesse estudo foi o número de Nusselt global Nu_{global} para cada resolução da malha numérica.

Para representar a resolução espacial da malha numérica, fez-se uso do parâmetro $d_b/\Delta l$, definido como o número de volumes de controle de dimensão $\Delta V = \Delta r \Delta z = \Delta l^2$ (ver Figura 4.29a) necessários para cobrir a distância de um diâmetro na região onde malha é refinada e estruturada, área dada pelo retângulo de comprimento B e largura E na Figura 3.2.

O parâmetro indica o número de volumes de controle na região da partícula fluida, relacionando a captura da posição da interface, solução da equação da conservação da massa, e da camada limite térmica, solução da equação da conservação da energia. O número de volumes de controle $N_{volumes}$ mostrado nas curvas desta seção são aqueles correspondentes a região no domínio computacional onde a malha é refinada, ou seja, a área delimitada na Figura 3.2 pelo retângulo de altura B e largura E .

Os valores de Nu_{global} para as malhas com diferentes discretizações espaciais são mostradas nas Figuras 4.21 – 4.27.

Figura 4.21 – Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 1,0$ e $\log(Mo) = -7,0$.

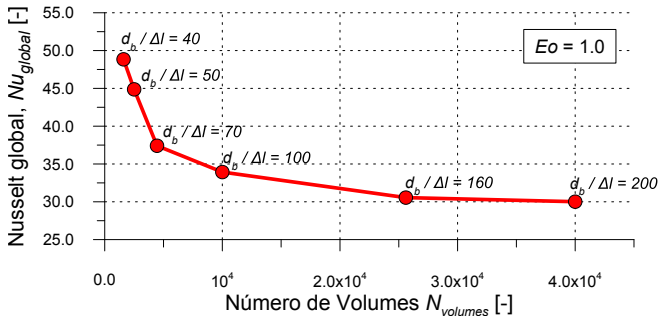


Figura 4.22 – Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 5,0$ e $\log(Mo) = -5,0$.

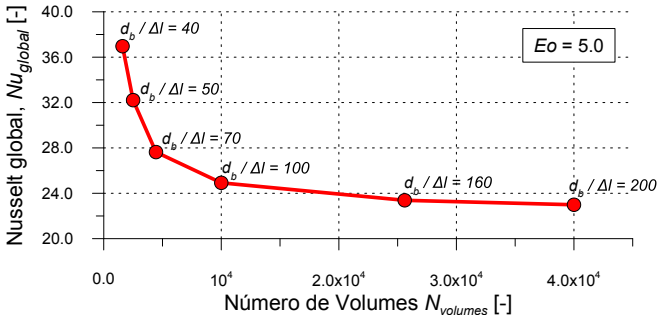


Figura 4.23 – Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 10,0$ e $\log(Mo) = -4,5$.

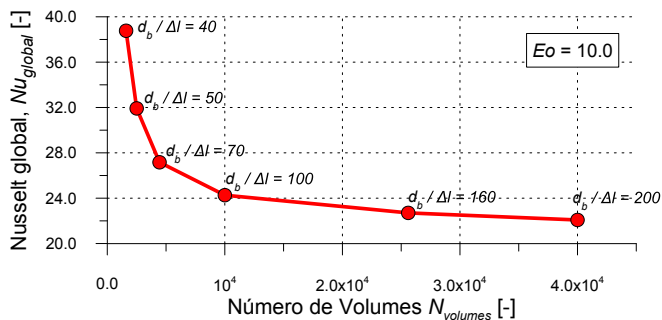


Figura 4.24 – Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 20,0$ e $\log(Mo) = -3,5$.

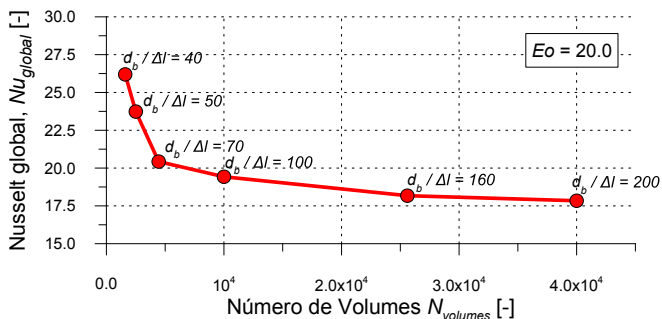


Figura 4.25 – Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 30,0$ e $\log(Mo) = -2,0$.

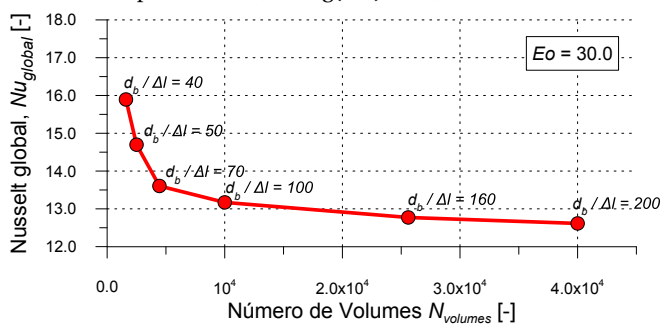


Figura 4.26 – Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 40,0$ e $\log(Mo) = -2,0$.

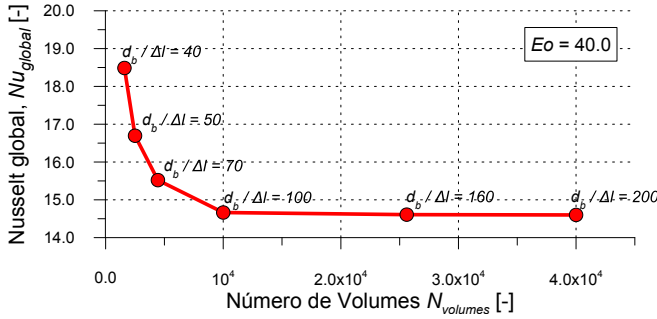
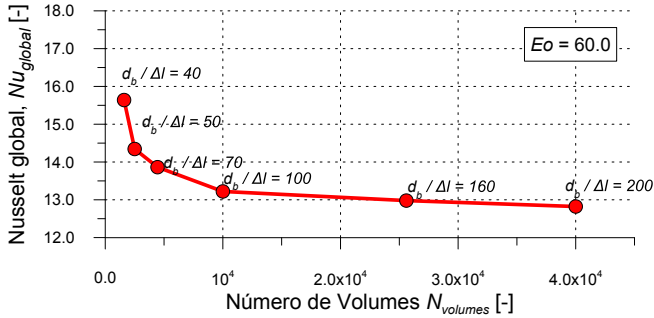


Figura 4.27 – Curva de convergência do estudo de independência de malha para $Eo = 60,0$ e $\log(Mo) = -1,0$.



De acordo com os resultados mostrados nas Figuras 4.21 – 4.27, a resolução de $d_b / \Delta l = 160$ é suficiente para o cálculo do número de Nusselt global Nu_{global} , uma vez que o resultado apresenta pequena variação quando comparado a malha com maior resolução ($d_b / \Delta l = 200$). A utilização de malhas computacionais com resolução maiores resulta em um tempo computacional excessivo, uma vez que a equação da conservação da massa, através da qual é resolvida a posição da interface, é resolvida de maneira explícita. Dessa forma, o máximo avanço temporal é definido em função do menor volume de controle do domínio. Assim, a técnica de utilizar volumes maiores em porções afastadas da região de interface não é capaz, sozinha, de reduzir o esforço computacional requerido na solução das equações governantes. Além do mais, a inclusão do termo de tensão superficial na equação da conservação da quantidade de movimento através do modelo *Continuum Surface Stress* (Lafaurie *et al.*, 1994)

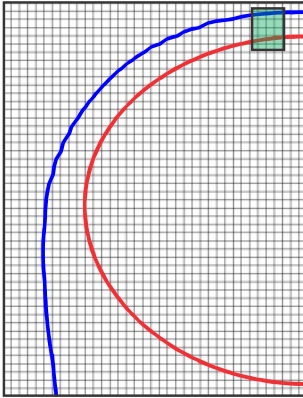
resulta em termos fonte demasiadamente elevados, que geram instabilidades numéricas na solução, motivando a necessidade de utilizar valores de número de Courant bem menores que 1,0, que seria o valor limite imposto pela solução explícita da equação da conservação da massa.

Para certificar-se que a discretização espacial da malha numérica considerada adequada através dos critérios previamente mencionados, o número de volumes de controle presentes na camada limite térmica foi qualitativamente analisado para cada resolução espacial. A região da camada limite térmica é uma região com espessura δ_{CLT} , definida como a distância da interface da partícula fluida até o local em que $\Omega = 0,99$, sendo Ω uma grandeza adimensional definida como,

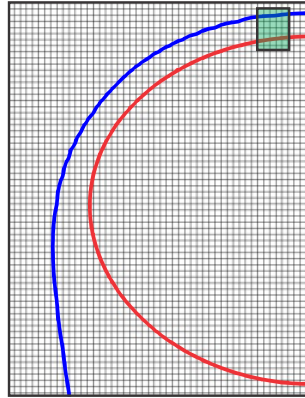
$$\Omega = \frac{T - T_s}{T_c - T_s} \quad (4.7)$$

A Figura 4.28 mostra as posições estimadas da interface para $\alpha_b = 0,5$ e da camada limite térmica para o caso em que $Eo = 1,0$, $\log(Mo) = -7,0$ (a situação com Re mais elevado nesse trabalho) e $Pr = 10,0$ para quatro resoluções da malha numérica. Em mais detalhes, na Figura 4.29, é mostrada a região da malha computacional entre a interface e a camada limite térmica, destacada na Figura 4.28, para diferentes discretizações espaciais.

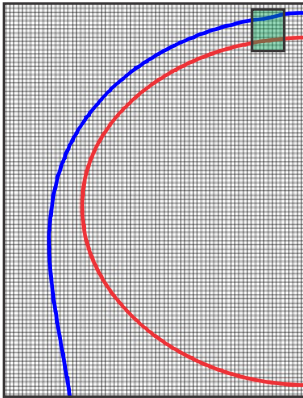
Figura 4.28 – Posições estimadas da interface ($\alpha_b = 0,50$) para uma iso-superfície de $\alpha_b = 0,5$ e da camada limite térmica ($\Omega = 0,99$) para o caso em que $Eo = 1,0$, $\log(Mo) = -7,0$ e $Pr = 10,0$.



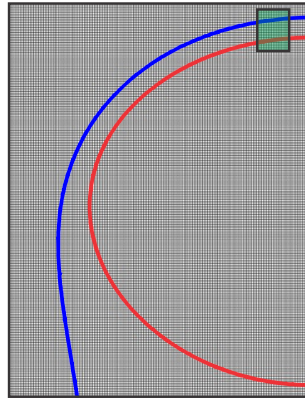
(a) $d_b / \Delta l = 50$



(b) $d_b / \Delta l = 70$

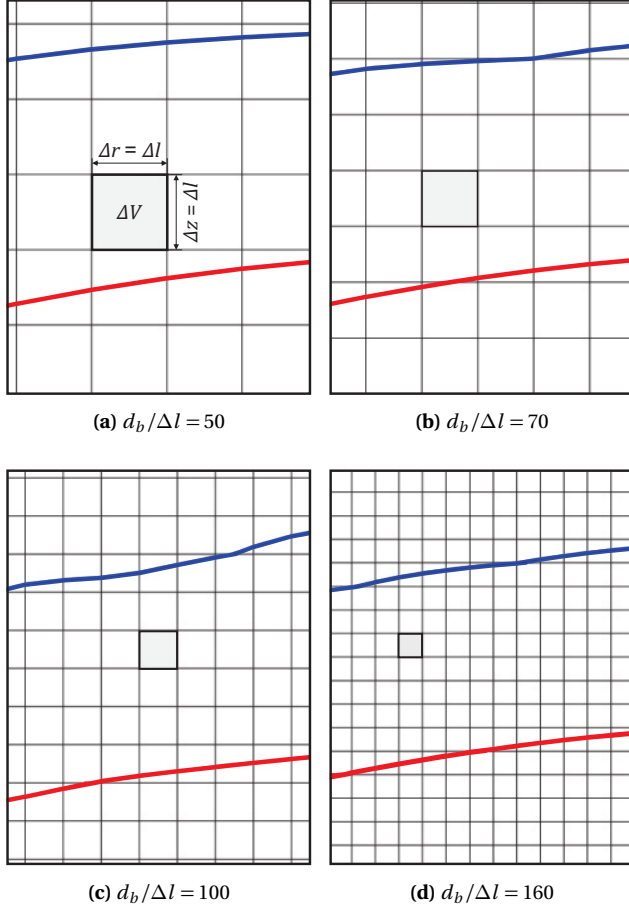


(c) $d_b / \Delta l = 100$



(d) $d_b / \Delta l = 160$

Figura 4.29 – Detalhe mostrando a região da malha computacional entre a interface ($\alpha_b = 0,50$) e a camada limnite térmica ($\Omega = 0,99$) para o caso em que $Eo = 1,0$, $\log(Mo) = -7,0$ e $Pr = 10,0$.



É importante ressaltar que essa análise deve ser vista como qualitativa, uma vez que a posição da interface não pode ser precisamente definida pelo método VOF. Entretanto, as Figuras 4.28 e 4.29 dão uma ideia da quantidade de volumes de controle localizados dentro da região delimitada pela posição da interface e da camada limite térmica.

4.4 Validação para Partículas Fluidas Esféricas

Como forma de validar os resultados obtidos para o coeficiente de transferência global de calor interfacial, os resultados numéricos para os casos considerando baixos valores de números de Eötvös (Eo), que resultaram em partículas fluidas esféricas ou quase-esféricas (para valores de $Re > 20,0$ a morfologia da interface distancia-se levemente daquela de uma esfera) foram comparados com algumas correlações para transferência de calor encontradas na literatura (Oellrich *et al.*, 1973; Ranz & Marshall, 1952; Takemura & Yabe, 1998). As correlações empregadas nessa comparação são as consideradas as mais adequadas, dentre as apresentadas no Capítulo 2, para o problema aqui estudado.

As Figuras 4.30 – 4.35 mostram os resultados obtidos neste trabalho para as partículas esféricas (baixo número de Eo) em conjunto com os resultados calculado através das correlações previamente discutidas. O número de Nusselt global (Nu_{global}) é plotado em função do número de Peclet ($Pe = Re \cdot Pr$) para todos os Pr considerados neste trabalho. Como esperado, em todas as curvas, à medida que $Re \rightarrow 0$, $Nu \rightarrow 2,0$, valor teórico para transferência de calor puramente difusiva.

Figura 4.30 – Curvas de Nu_{global} obtidas no presente trabalho e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 0,5$.

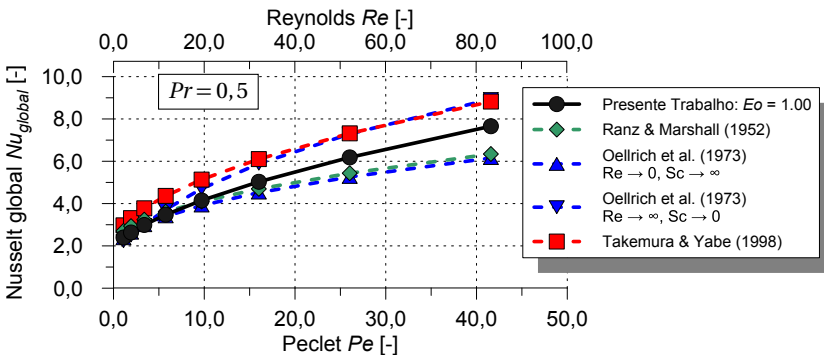


Figura 4.31 – Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 0,75$.

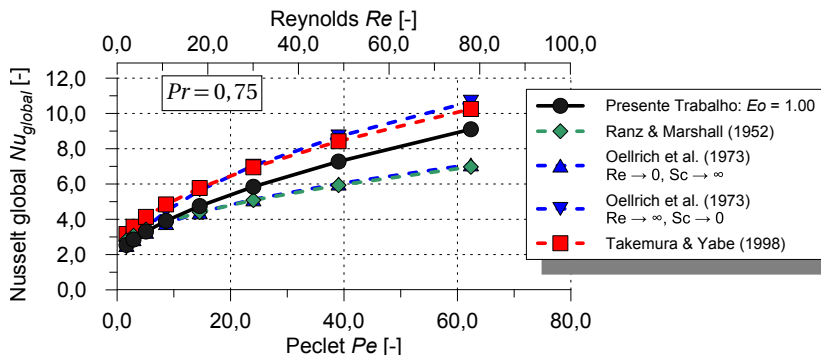


Figura 4.32 – Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 1,0$.

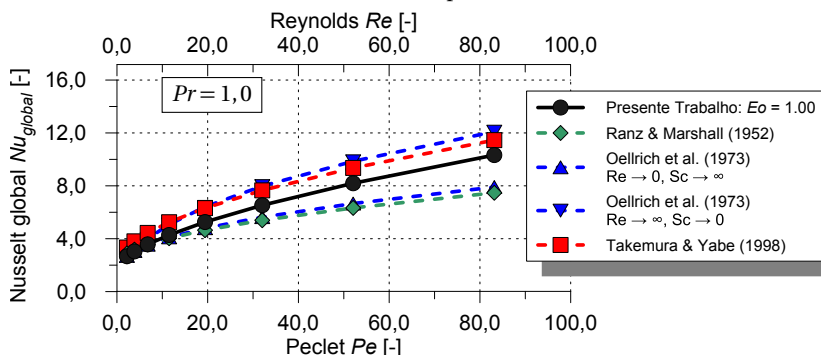


Figura 4.33 – Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 2,5$.

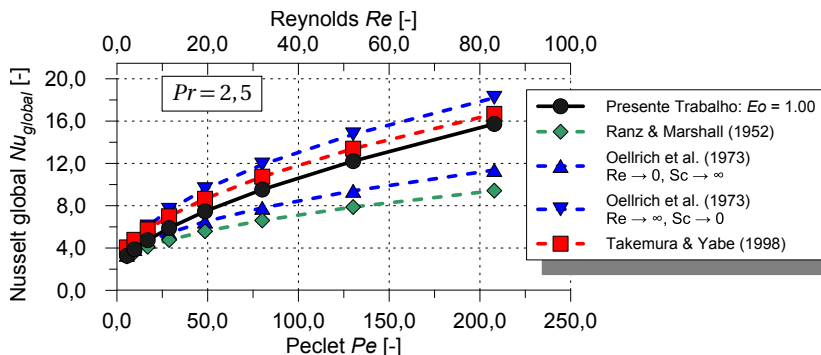


Figura 4.34 – Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 5,0$.

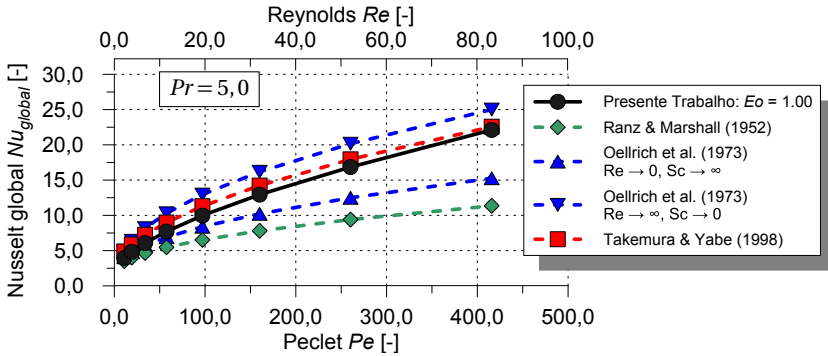
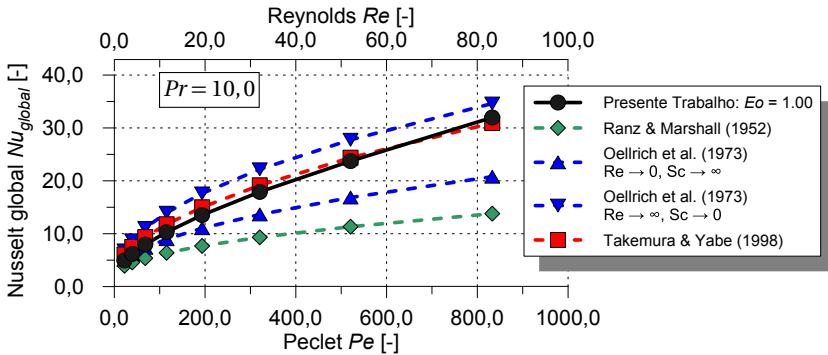


Figura 4.35 – Curvas de Nu_{global} obtidas e comparação com correlações encontradas na literatura para $Pr = 10,0$.



De acordo com os gráficos apresentados nas Figuras 4.30 – 4.35, os valores obtidos através da correlação de Ranz & Marshall (1952), que é amplamente empregada para modelar a transferência de calor e massa interfacial no contexto do modelo de dois fluidos para partículas sólidas e fluidas, situa-se abaixo de todas as correlações comparadas, inclusive da curva limitante inferior da correlação de Oellrich *et al.* (1973).

Para todos os valores de Pr considerados, o valor obtido das simulações numéricas nesse trabalho encontra-se entre as duas curvas limitantes da correlação de Oellrich *et al.* (1973) (Equações (2.29) e (2.29)) e apresenta concordância crescente com a correlação formulada por Takemura & Yabe (1998) à medida que o valor de Pr é aumentado, especialmente para os valores de $Pr = 5,0$ e $Pr = 10,0$, conforme as Figuras 4.34 e 4.35,

respectivamente.

A correlação de Takemura & Yabe (1998) foi desenvolvida a partir dos resultados experimentais de bolhas ascendendo em líquidos, porém não considerando o escoamento interno da partícula fluida. Pode-se observar também que os valores de Nu_{global} são plotados até valores máximos de Re de aproximadamente 80, visto que a correlação é válida para valores de Re até 100. A discrepância dos resultados para Pr menores pode ser atribuída ao intervalo de valores Schmidt Sc , variando entre 100 e 1000, considerado nas simulações utilizadas para ajustar as correlações e, também, pela equação proposta no trabalho não ser bem ajustada para baixos números de Sc (ou Pr).

A partir dos resultados apresentados nesta seção, e das análises envolvendo estudos de influência do *far-field* e refino de malha, considera-se que o modelo numérico implementado nesse trabalho representa adequadamente a transferência de calor ao redor de partículas fluidas. Desse modo, nos capítulos seguintes, o modelo será utilizado para análise da transferência de calor interfacial ao redor de partículas fluidas esféricas e não-esféricas, permitindo a formulação de uma correlação para a transferência de calor ou massa interfacial, o que se constitui como um dos principais objetivos deste trabalho.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo tem como objetivo apresentar os resultados obtidos a partir das análises da transferência de calor local e global. Assim, na primeira seção, com a finalidade de verificar se as morfologias obtidas através das simulações dos casos mostrados na Figura 3.7, são as esperadas para cada regime, comparam-se as morfologias obtidas com a correlação gráfica apresentada em Clift *et al.* (2013), sobre a qual foram sobrepostos os casos do planejamento numérico. Esse gráfico correlaciona a deformação das partículas fluidas como função dos parâmetros adimensionais Eo e Mo . As morfologias obtidas também são comparadas por meio da excentricidade, através da comparação dos resultados obtidos com a correlação experimental proposta por (Liu *et al.*, 2015). A seguir é apresentado um estudo detalhado da estrutura do escoamento e da transferência de calor nas proximidades da interface para diferentes morfologias da partícula fluida e diferentes propriedades da fase contínua, considerando a metodologia descrita no Capítulo 3, lembrando que esta análise pode apenas ser considerada em forma qualitativa. No entanto, as conclusões obtidas desta análise auxiliam na compreensão dos resultados dos parâmetros globais. Em seguida, são apresentados e analisados os resultados obtidos para os parâmetros globais de transferência de calor. Nessa análise, também é discutida a necessidade da introdução de uma correlação para o cálculo adequado da densidade de área interfacial, parâmetro fundamental no contexto do modelo de dois fluidos, bem como o desenvolvimento das correlações de fechamento

para a transferência de calor. Por fim, a partir da definição de um caso de referência simplificado, as correlações desenvolvidas nesta dissertação são utilizadas para verificar o efeito da deformação das partículas fluidas na transferência de massa interfacial, no contexto do Modelo de dois Fluidos.

5.1 Morfologia da Interface

O objetivo desta seção é mostrar o papel do balanço das forças inerciais, de empuxo, viscosas e de tensão superficial na morfologia das interfaces resultantes das simulações e comparar o formato final das partículas fluidas com outros trabalhos. As morfologias obtidas das simulações a partir dos casos definidos na Figura 3.7 serão comparadas com as esperadas de acordo com a correlação gráfica apresentada em Clift *et al.* (2013) e com a correlação para a excentricidade de Liu *et al.* (2015). Para isso, a análise é realizada a partir das grandezas adimensionais Reynolds (Re), Eötvös (EO), Morton (Mo) e Weber (We), conforme discutido no Capítulo 3. Essas grandezas adimensionais, de acordo com Rosa (2012), podem ser entendidas como,

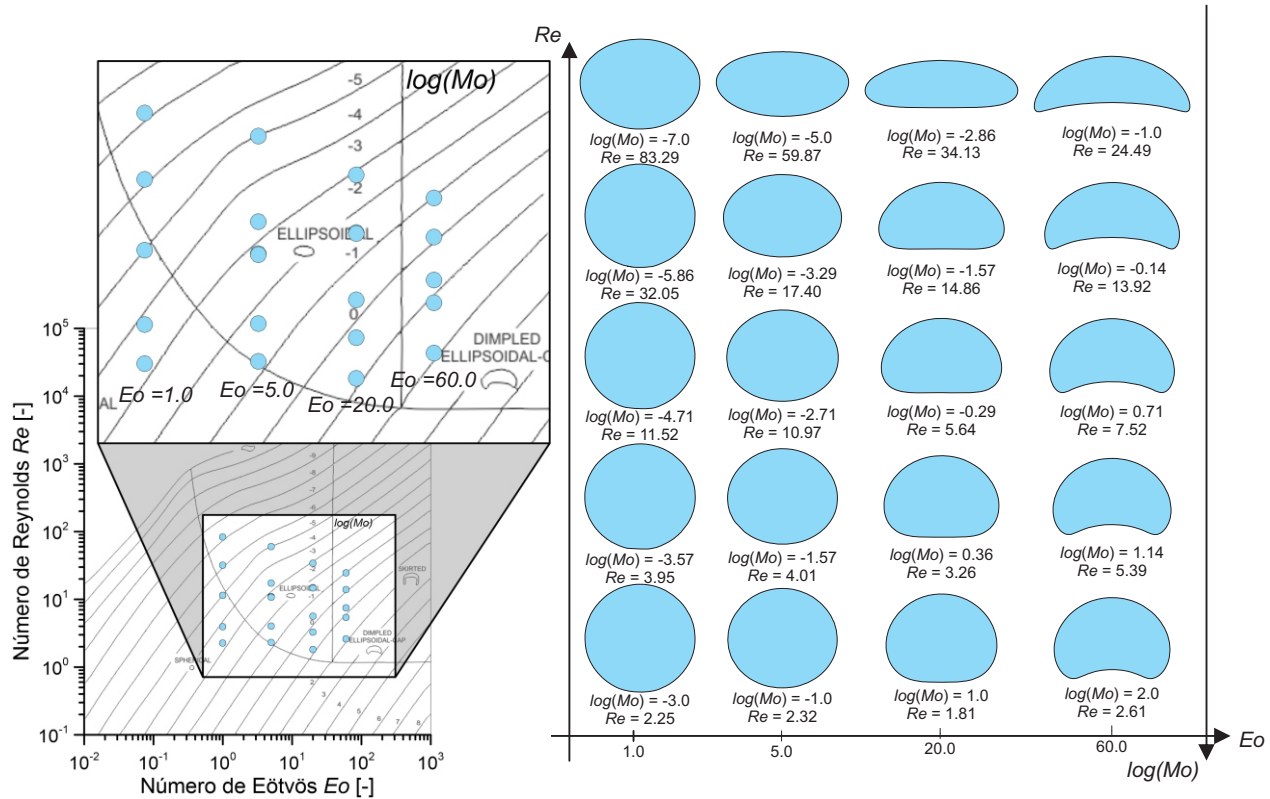
$$Re = \frac{\text{Inércia}}{\text{Viscosidade}} \quad (5.1)$$

$$EO = \frac{\text{Empuxo}}{\text{T. Superficial}} \quad (5.2)$$

$$Mo = \frac{\text{Empuxo} \cdot \text{Viscosidade}}{\text{T. Superficial} \cdot \text{Inércia}} \quad (5.3)$$

$$We = \frac{\text{Inércia}}{\text{T. Superficial}} \quad (5.4)$$

Figura 5.1 – Morfologia resultante da interface das partículas fluidas conforme alteração das grandezas adimensionais de Re , Eo e Mo .



Na Figura 5.1 apresentam-se as morfologias das interfaces obtidas para partículas fluidas com diferentes níveis de distorção (em relação a esfera), mostrando seu formato final e a localização das mesmas no diagrama apresentado em Clift *et al.* (2013). Conforme observado, os resultados numéricos obtidos neste trabalho concordam bem com a morfologia da interface, esperada para cada região do gráfico, e o número de Re obtido, lembrando que esses pontos foram definidos a partir dos valores de Eo e Mo , como previamente discutido no Capítulo 3. Essa concordância é melhor percebida através dos valores máximos e mínimos do valor Mo para toda a faixa de Eo do gráfico, uma vez que são valores inteiros (exceto o Re máximo em $Eo = 20.0$) e situam-se muito próximos das isolinhas de $\log(Mo)$ da correlação gráfica.

Com relação ao efeito das grandezas adimensionais e a importância na interpretação das morfologias resultantes, pode-se observar que o aumento do valor do número de Re ¹, para um dado Eo constante, causa uma distorção no formato da partícula fluida, ocasionando um aumento na área interfacial. O mesmo acontece quando aumenta-se o número de Eo e Re de maneira conjunta. Nessa situação, a partícula fluida altera seu formato de esférico para esferoidal em baixos Eo e à medida que esse parâmetro é aumentado, a transição ocorre dentro do regime morfológico esferoidal-cap, com aumento da razão de aspecto.

Analisando os resultados da Figura 5.1 a partir da definição dos parâmetros adimensionais envolvidos (Eqs. (5.1) – (5.3)), observa-se que para a situação em que o número de Re é aumentado, para um valor de Eo fixo, a distorção é provocada devido ao aumento da grandeza das forças inerciais e diminuição das forças viscosas. À medida que os números de Eo e Re são aumentados simultaneamente, juntamente com os efeitos anteriores, há uma diminuição dos efeitos da tensão superficial e aumento das forças de empuxo. Esses dois efeitos em conjunto, das forças de empuxo e tensão superficial, permitem a deformação da partícula fluida para o formato esferoidal e esferoidal-calota.

Os resultados numéricos obtidos também foram comparados com os resultados de Liu *et al.* (2015) que formulou uma correlação para a excentricidade E baseado em resultados experimental para partículas de ar ascendendo em um meio altamente viscosos. A excentricidade E da

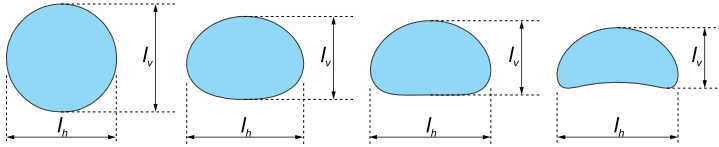
¹Na realidade, os parâmetros de entrada são Eo e Mo e a diminuição deste último, resulta em uma aumento de Re

partícula fluida é definida como,

$$E = \frac{l_h}{l_w} \quad (5.5)$$

em que l_h e l_w representam a altura e comprimento máximo da partícula fluida, conforme a Figura 5.2

Figura 5.2 – Dimensões l_h e l_w utilizadas para o cálculo da excentricidade E para diferentes morfologias.

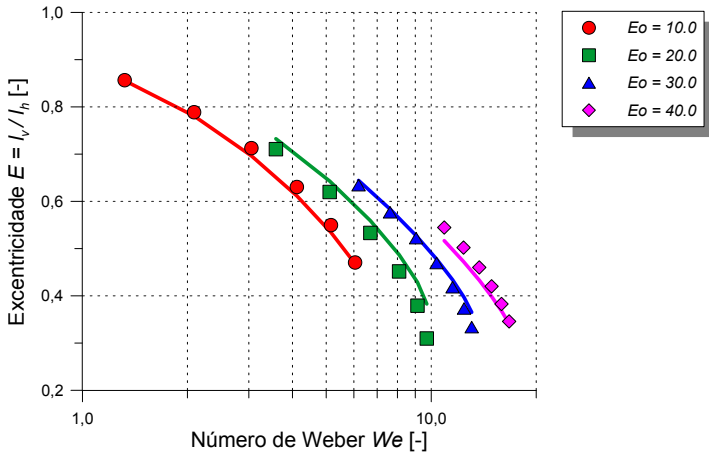


A correlação para excentricidade de Liu *et al.* (2015) é função do número de Weber We e Reynolds Re , definida como,

$$E = \frac{1,0}{0,9914 + 0,1147 We^{0,5678} Re^{0,3841}} \quad (5.6)$$

Os valores de E calculados pela correlação de Liu *et al.* (2015) e dos resultados numéricos que situam-se na faixa desse trabalho experimental são mostrados na Figura 5.3.

Figura 5.3 – Comparação da excentricidade das partículas obtidas numericamente (pontos) e a correlação Liu *et al.* (2015) (linha contínua).



Na Figura 5.3 é possível observar que apesar dos valores numéricos não coincidirem exatamente com a correlação de Liu *et al.* (2015), os mesmos seguem a tendência das curvas. Abaixo, o resultado dos pontos mostrados na Figura 5.3 e a diferença percentual entre os valores são mostrados nas Tabelas 5.1 - 5.4 para os diferentes Eo .

Tabela 5.1 – Valores da excentricidade E obtidos das simulações numéricas e calculados a partir da correlação de Liu *et al.* (2015) para $Eo = 10,0$.

Eo	$\log(Mo)$	Re	We	E	E (Liu <i>et al.</i> , 2015)	E^{dif} [%]
10,0	-0,64	3,72	2,09	0,79	0,78	0,97
10,0	-1,29	6,51	3,05	0,71	0,70	2,28
10,0	-1,93	10,95	4,12	0,63	0,61	2,99
10,0	-2,57	17,75	5,16	0,55	0,53	2,81
10,0	-3,21	27,83	6,05	0,47	0,47	0,46

Tabela 5.2 – Valores da excentricidade E obtidos das simulações numéricas e calculados a partir da correlação de Liu *et al.* (2015) para $Eo = 20,0$.

Eo	$\log(Mo)$	Re	We	E	E (Liu <i>et al.</i> , 2015)	E^{dif} [%]
20,0	0,36	3,26	3,59	0,71	0,73	3,06
20,0	-0,29	5,64	5,12	0,62	0,64	3,65
20,0	-0,93	9,34	6,69	0,53	0,56	4,71
20,0	-1,57	14,86	8,09	0,45	0,49	7,34
20,0	-2,21	22,86	9,13	0,38	0,43	11,62
20,0	-2,86	34,13	9,71	0,31	0,38	19,18

Tabela 5.3 – Valores da excentricidade E obtidos das simulações numéricas e calculados a partir da correlação de Liu *et al.* (2015) para $Eo = 30,0$.

Eo	$\log(Mo)$	Re	We	E	E (Liu <i>et al.</i> , 2015)	E^{dif} [%]
30,0	0,57	4,19	6,19	0,63	0,64	1,61
30,0	0,14	5,95	7,62	0,58	0,58	1,21
30,0	-0,29	8,30	9,05	0,52	0,53	1,07
30,0	-0,71	11,37	10,36	0,47	0,48	1,78
30,0	-1,14	15,33	11,51	0,42	0,43	3,71
30,0	-1,57	20,38	12,42	0,37	0,40	6,01
30,0	-2,00	26,75	13,07	0,33	0,37	8,69

Tabela 5.4 – Valores da excentricidade E obtidos das simulações numéricas e calculados a partir da correlação de Liu *et al.* (2015) para $Eo = 40,0$.

Eo	$\log(Mo)$	Re	We	E	E (Liu <i>et al.</i> , 2015)	E^{dif} [%]
40,0	0,29	7,04	10,90	0,54	0,52	5,31
40,0	-0,07	9,22	12,38	0,50	0,47	6,20
40,0	-0,43	11,93	13,73	0,46	0,43	6,15
40,0	-0,79	15,26	14,90	0,42	0,40	5,28
40,0	-1,14	19,36	15,90	0,38	0,37	3,86
40,0	-1,50	24,39	16,73	0,35	0,34	1,27

Das Tabelas 5.1 - 5.4 e da Figura 5.3 conclui-se que os resultados numéricos obtidos concordam de maneira satisfatória com a correlação proposta por (Liu *et al.*, 2015).

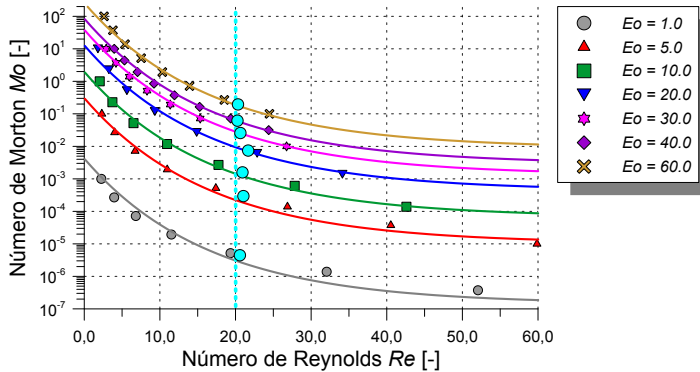
Resumidamente, a partir desta análise conclui-se que os parâmetros a serem analisados na quantificação da deformação das partículas fluidas devem ser os números de Reynolds (Re) e Eötvös (Eo), sendo esses utilizados nas duas análises subsequentes (análises local e global da transferência de calor) e como parâmetros independentes na formulação das correlações para a transferência de calor interfacial.

5.2 Análise Local da Transferência de Calor

A análise da transferência de calor interfacial local ao redor de partículas fluidas esféricas e distorcidas é apresentada nessa seção. Como discutido nas seções anteriores, a distribuição local de Nu ao longo da interface, calculada explicitamente a partir dos fluxos na interface só pode ser considerada de forma qualitativa. Entretanto, a análise realizada nos parágrafos subsequentes é importante para compreender como a distorção da partícula fluida afeta o fenômeno da transferência de calor e servirá de suporte para descrever as tendências observadas na transferência de calor global. Nestas análises, com objetivo de comparar os diferentes casos, os perfis do Nusselt local (Nu_{local}) ao longo da interface foram normalizados através da diferença entre seus máximos e mínimos (Equação (5.9)). A mesma metodologia foi empregada em todos os casos, permitindo uma comparação qualitativa do fenômeno local para todos os diferentes casos estudados.

A análise da transferência de calor local foi realizada sobre os casos mostrados pelos quadrados vermelhos na Figura 3.7, com valor de $Re \approx 20,0$. Para encontrar o número de Morton (Mo) preciso para cada Eo , que resultasse no valor de Re definido, os valores numéricos das curvas de Re vs. Mo foram aproximados por uma função analítica exponencial, para cada Eo . Através dessa função exponencial, os pontos de $Re = 20,0$ foram calculados e então foram simulados os casos para diferentes valores de Pr . A Figura 5.4 mostra os valores dos pontos numéricos, as funções que os aproximam e o resultado da simulação com os Mo aproximados. Este procedimento se faz necessário uma vez que o Re da partícula fluida obtido é um resultado das simulações e não um parâmetro de entrada. Desta forma, definindo o Eo , o número de Mo deve se calculado de tal forma que resulta no valor de Eo desejado.

Figura 5.4 – Resultado numérico das curvas de Re vs. Mo para cada Eo , curvas de ajuste e Re obtido através dos valores de Mo aproximados.



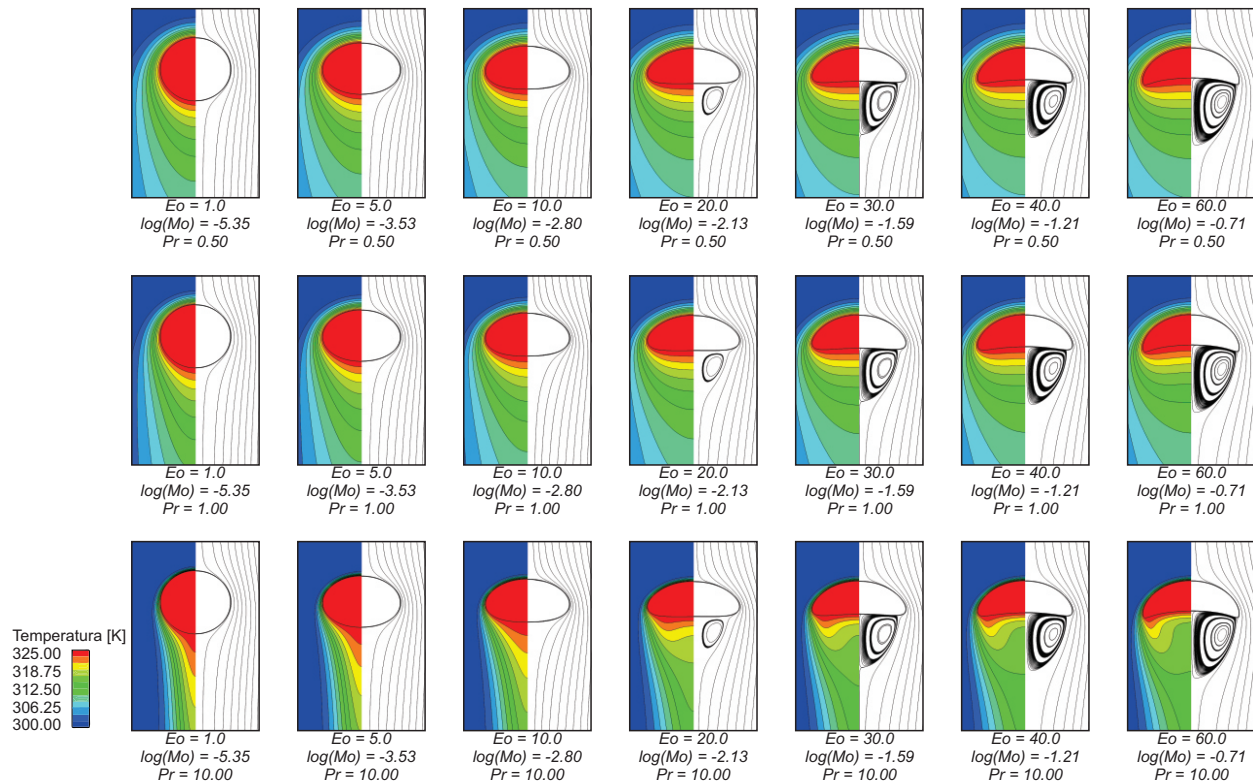
Embora os valores de Re obtidos através da aproximação não resultaram em valores exatos de $Re = 20,0$, a utilização dessa metodologia resultou em valores muito próximos dos desejados. A Tabela 5.5 mostra os valores de $\log(Mo)$ dessa aproximação e a diferença percentual do número de Reynolds Re^{dif} estimados em relação ao desejado.

Tabela 5.5 – Valores de $\log(Mo)$ estimados para cada Eo a partir da metodologia descrita, valores de Re obtidos e diferença percentual do número de Reynolds Re^{dif} estimados em relação ao desejado ($Re = 20,0$).

Eo	$\log(Mo)$	Re	Re^{dif} [%]
1,0	-5,35	20,6	2,8
5,0	-3,53	21,0	5,1
10,0	-2,80	20,9	4,5
20,0	-2,13	21,6	8,2
30,0	-1,59	20,6	3,1
40,0	-1,21	20,2	1,2
60,0	-0,71	20,3	1,5

Apesar dos valores mostrados na Figura 5.4 e Tabela 5.5 não coincidirem exatamente com o valor definido, esta metodologia permite manter o valor de Re resultante, muito próximo da faixa desejada. Deste modo, a Figura 5.5 mostra o formato da partícula fluida, os campos de temperatura e as linhas de corrente para os casos mostrados na Tabela 5.5 com diferentes valores do número de Prandtl Pr .

Figura 5.5 – Morfologia obtida das diferentes partículas fluidas para valores de Eo , contornos dos campos de temperatura e linhas de corrente ao seu redor após alcançar o regime permanente para diferentes números de Prandtl Pr com $Re \approx 20,0$.



Da Figura 5.5, a partir de uma análise visual, pode se observar como a distorção da partícula (distanciamento do formato esférico) afeta a estrutura do escoamento e o a distribuição de temperaturas ao redor da mesma. Conforme a deformação aumenta (aumento do número de Eu) a camada limite se descola e uma recirculação começa a se formar na região traseira das partículas. O efeito do número de Prandtl Pr no campo de temperatura ao redor das partículas é visto na diminuição da espessura da camada de limite térmica à medida que este aumenta. Na região traseira, em situações em que a partícula fluida apresenta um formato esférico ou esferoidal, conforme aumenta o valor de Pr , observa-se um estreitamento e alongamento da região termicamente afetada pela presença da partícula. Entretanto, para partículas que apresentam uma maior distorção ($Eu = 20,0 \sim Eu = 60,0$), as linhas de contorno apresentam uma inflexão devido a presença da recirculação no escoamento. Essa inflexão torna-se mais evidente à medida que Pr (ou Pe , para um mesmo Re) é aumentado. Para essa situação, fluido a uma temperatura mais baixa é transportado para a região próxima da interface na parte traseira das partículas, elevando o gradiente de temperatura na região e consequentemente, a transferência de calor local. Entretanto, esse efeito no valor de Nu_{global} é pequeno, como será discutido mais adiante, visto que a maior parte da transferência de calor interfacial ocorre no hemisfério frontal da partícula fluida, especialmente para os casos mais distorcidos.

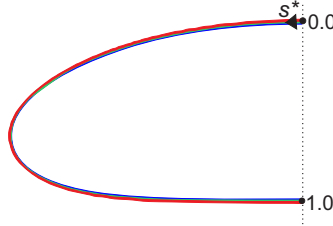
Para mostrar como o distanciamento do formato esférico e o perfil de velocidade próximo da interface afeta a transferência de calor local, curvas com os valores do número de Nusselt local normalizado Nu_{local}^* e da velocidade tangencial normalizada u_t^* são plotadas ao longo da interface da partícula fluida.

A distância normalizada ao longo da interface s^* , definida como,

$$s^* = \frac{s}{s_{max}} \quad (5.7)$$

é usada como ordenada. Esta variável pode ser visualizada na Figura 3.4 e é novamente apresentada na Figura 5.6. Para partículas perfeitamente esféricas, s^* pode ser relacionada com a coordenada angular, de modo que $s^* = \theta / \pi$.

Figura 5.6 – Interfaces obtidas para as diferentes iso-superfícies de α_b e a distância normalizada ao longo da interface s^* .



A velocidade tangencial u_t é definida como,

$$u_t = \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} \quad (5.8)$$

em que \mathbf{t} é um vetor unitário tangente a interface e definido como um vetor unitário perpendicular ao vetor normal a interface. Devido ao domínio ser axissimétrico, o vetor é unicamente definido. O número de Nusselt local normalizado Nu_{local}^* e a velocidade tangencial normalizada u_t^* são, respectivamente, definidos como,

$$Nu_{local}^* = \frac{Nu_{local} - Nu_{local}^{min}}{Nu_{local}^{max} - Nu_{local}^{min}} \quad (5.9)$$

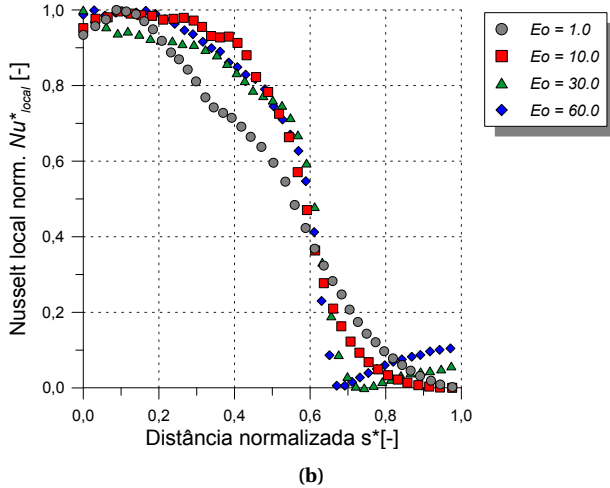
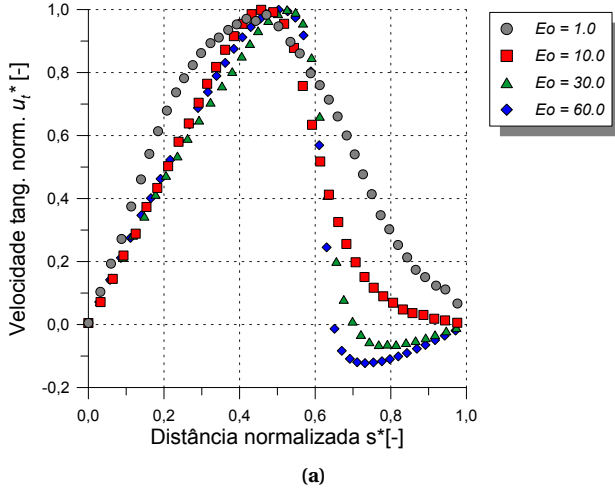
e

$$u_t^* = \frac{u_{t \ local}}{u_{t \ max}}, \quad (5.10)$$

em que os subscritos *local*, *max* e *min* referem-se, respectivamente, aos valores locais, máximos e mínimos. A velocidade u_t^* representa a velocidade tangencial na interface e espera-se uma correlação positiva entre o seu valor, e a intensidade do fluxo de calor local. Além disso, do ponto de vista hidrodinâmico, esta variável está relacionada ao descolamento da camada limite, aproximando-se de zero na região de descolamento, e quando negativo, indicando uma região de recirculação no escoamento.

De forma a visualizar o comportamento dos parâmetros discutidos nos parágrafos acima, a Figura 5.7 apresenta as curvas de u_t^* e Nu_{local}^* ao longo da interface, para diferentes Eo com $Re \approx 20,0$ e $Pr = 10,0$.

Figura 5.7 – Perfis da velocidade tangencial u_t^* (a) e número de Nusselt local Nu_{local}^* (b) normalizado ao longo da interface para $Re \approx 20,0$ e $Pr = 10,0$.



Nos perfis mostrados na Figura 5.7, duas regiões distintas podem ser observadas em todos os casos, separados por um ponto onde u_t^* é máximo. Próximo desse ponto, há o aparecimento de uma região de transição na distribuição do valor de Nu_{local}^* . À medida que o valor de Eo aumenta, o ponto de máximo u_t^* desloca-se para a porção traseira da

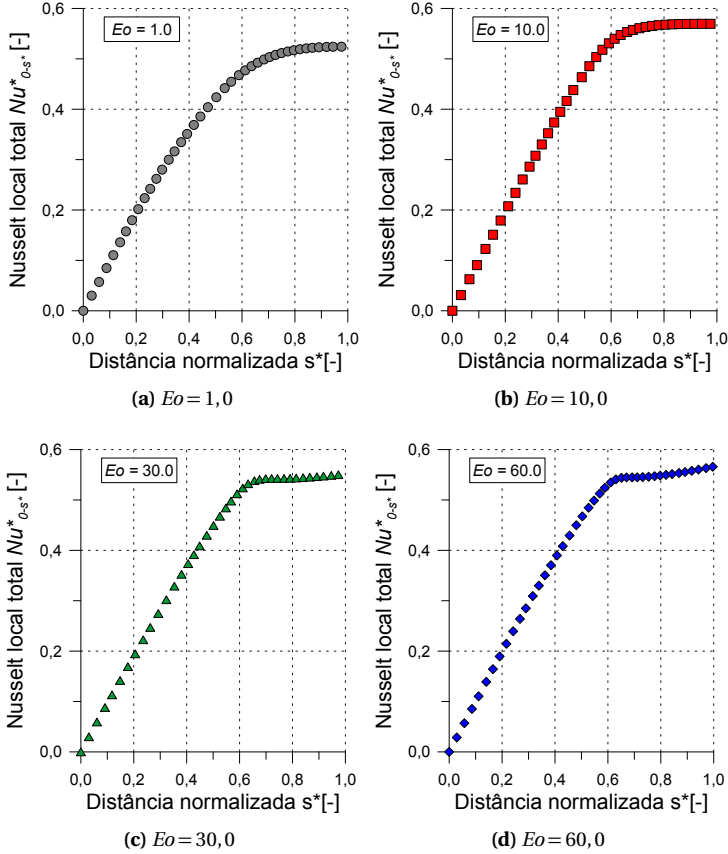
partícula fluida e a divisão entre as duas regiões no perfil de Nusselt local, entre hemisfério frontal e traseiro, torna-se mais evidente. Para $Eo = 1,0$, situação em que a partícula possui um formato esférico, o fluxo de calor interfacial decai de maneira suave do seu valor máximo da porção dianteira até o seu mínimo na traseira, não existindo uma separação clara entre os dois hemisférios na distribuição de Nu_{local}^* . Por outro lado, para uma partícula fluida um pouco mais distorcida, com $Eo = 10,0$ e formato esferoidal, o perfil de Nu_{local}^* se altera, apresentando uma região de transição entre $s^* \approx 0,40$ e $s^* \approx 0,80$, onde a transferência de calor interfacial é acentuada na região frontal e reduzida na região traseira. Na situação em que $Eo = 30,0$, a partícula fluida tem um formato mais próximo do esferoidal-calota e já existe uma recirculação em sua região traseira. Nesse mesmo caso há, para $Eo = 10,0$, uma região de transição no perfil de Nu_{local}^* , porém em função da recirculação na região traseira, o fluxo de calor interfacial nessa região é ligeiramente aumentado. No último caso mostrado na Figura 5.7, $Eo = 60,0$ e formato esferoidal-capa, o perfil de velocidades é similar ao mostrado para $Eo = 30,0$, mas com uma recirculação mais intensa na região traseira da partícula. Assim, o perfil de Nu_{local}^* é similar ao encontrado para $Eo = 30,0$, com o aumento do fluxo de calor interfacial na região devido ao vórtice, que agora mais intenso, direciona fluido a uma temperatura mais baixa para essa região de recirculação, aumentando o gradiente de temperatura e elevando a transferência de calor local. Entretanto, os efeitos de recirculação na região traseira pouco influenciam no valor da transferência de calor global.

Com o objetivo de tornar mais clara a participação de cada hemisfério na transferência de calor global, especialmente em função da presença da região de recirculação na traseira, define-se um número de Nusselt total normalizado como,

$$Nu_{0-s^*}^* = \int_0^{s^*} Nu_{local}^* ds^* \quad (5.11)$$

A Figura 5.8 apresenta o perfil de $Nu_{0-s^*}^*$ ao longo da interface da partícula fluida para diferentes números de Eo para $Pr = 10,0$ e $Re \approx 20,0$, onde se observa que a maior parte de da transferência de calor, *i.e.*, a maior contribuição para o Nu_{global}^* resultante, se dá no hemisfério frontal das partículas, principalmente para partículas distorcidas.

Figura 5.8 – Número de Nusselt total normalizado $Nu_{0-s^*}^*$ (Equação (5.11)) ao longo da interface para $Pr = 10,0$ e $Re \approx 20,0$.



A partir das curvas da Figura 5.8 fica evidente que uma parte significativa da transferência de calor ocorre no hemisfério frontal das partículas fluidas, independente do grau de deformação, visto que a curva de $Nu_{0-s^*}^*$ apresenta uma grande inclinação na região do hemisfério frontal, que se reduz à medida que avança em direção ao hemisfério traseiro. O efeito do aumento da transferência de calor local em virtude da presença da recirculação de fluido é vista de maneira sutil para $Eo = 30,0$ (Figura 5.8c) e mais evidente para $Eo = 60,0$ (Figura 5.8d), uma vez que a curva de $Nu_{0-s^*}^*$ não se mantém plana, mas apresenta um nível de inclinação, dando indícios que a porção traseira está contribuindo, em menor grau,

na transferência de calor global. É importante enfatizar que não é possível retirar informações quantitativas a partir dos valores apresentados nessa seção, pois as análises realizadas estão sendo conduzidas a partir de perfis normalizados, sendo que a magnitude das mesmas diferem. A análise quantitativa da transferência de calor interfacial será mostrada na seção a seguir a partir dos valores obtidos para o número de Nusselt global Nu_{global} .

Para os casos mostrados na Figura 5.5, o perfil da espessura da camada limite térmica relativa δ'_{CLT} definido aqui como,

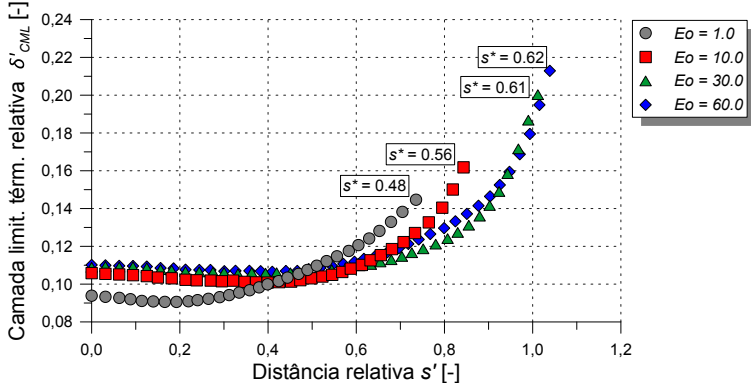
$$\delta'_{CLT} = \frac{\delta_{CLT}}{d_b} \quad (5.12)$$

é plotado para diferentes valores do número de Eo e $Pr = 10,0$, na Figura 5.9. Nessa ilustração, optou-se por não utilizar a variável s^* como ordenada, pois a mesma suprime a informação sobre a distância total do comprimento de desenvolvimento na porção frontal da partícula. Assim, a distância relativa s' ao longo da interface foi utilizada como ordenada, sendo essa definida por,

$$s' = \frac{s}{d_b} \quad (5.13)$$

O gráfico apresenta o perfil da camada limite até o ponto máximo da região frontal, definido pela variável s^*_{trans} , cuja definição exata será apresentada no decorrer dos próximos parágrafos.

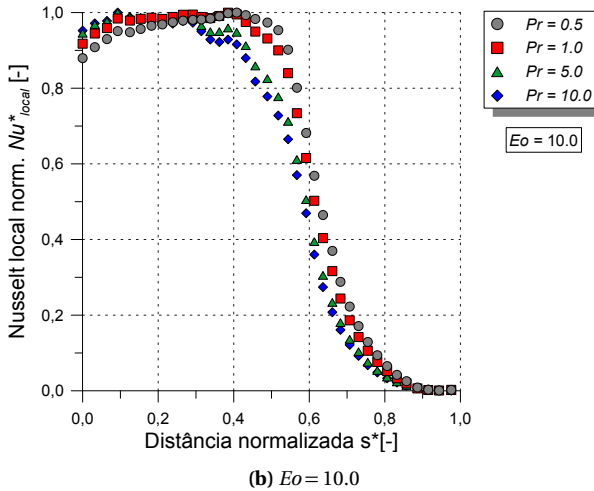
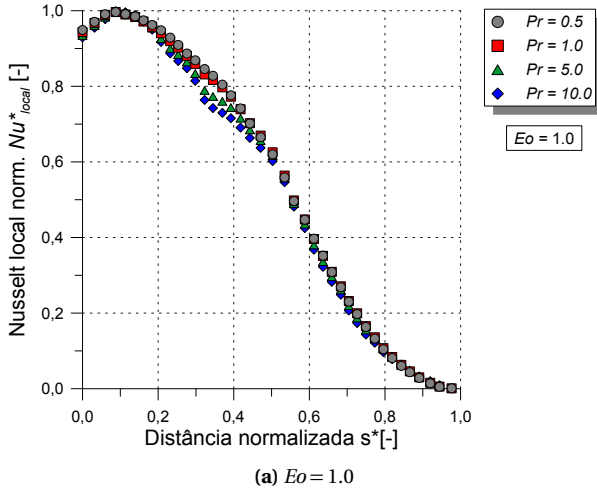
Figura 5.9 – Perfil da espessura da camada limite térmica relativa δ'_{CML} ao longo da interface para diferentes valores do número de Eo para $Re \approx 20,0$ e $Pr = 10,0$. Em detalhe, valor de s^* correspondente na ordenada s' .

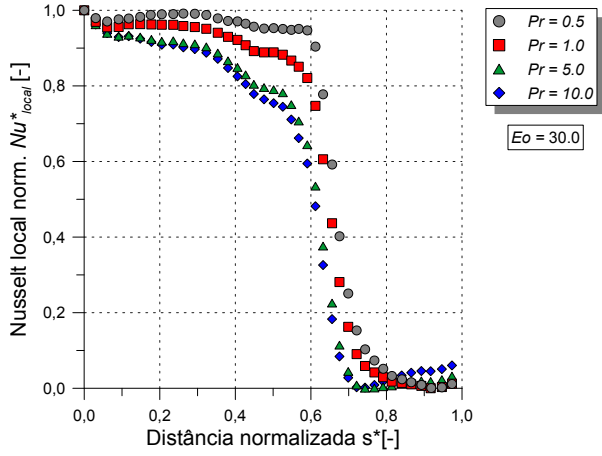


Na Figura 5.9, é possível observar que, quanto maior a distorção da partícula, maior é a região de desaceleração do escoamento na região frontal, i.e., a camada limite necessita de um comprimento maior para se desenvolver (de maneira análoga ao escoamento perpendicular a uma placa plana).

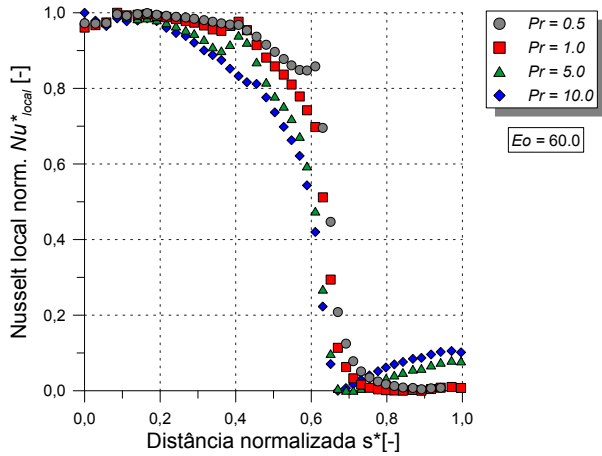
O acoplamento entre a transferência de calor e quantidade de movimento pode ser analisado por meio da influência do número de Prandtl Pr na distribuição local da transferência de calor, uma vez que a grandeza adimensional representa a relação entre a difusão da transferência de calor e da quantidade de movimento. Outra grandeza adimensional importante para o estudo do fenômeno é o número de Peclet Pe que representa a razão entre os termos difusivos e advectivos para o transporte de energia. Contudo, como na análise conduzida aqui, o número de Reynolds Re é mantido constante ($Re \approx 20,0$), ela pode ser conduzida apenas variando o número de Prandtl Pr . Assim, para ilustrar o efeito de Pr na transferência de calor local ao longo da interface, a distribuição local de Nu^*_{local} para diferentes Eo com $Re \approx 20,0$ são apresentadas na Figura 5.10.

Figura 5.10 – Efeito do número de Prandtl Pr na transferência de calor local ao longo da interface para diferentes morfologias (números de Eo) para um mesmo número de Re .





(c) $Eo = 30.0$



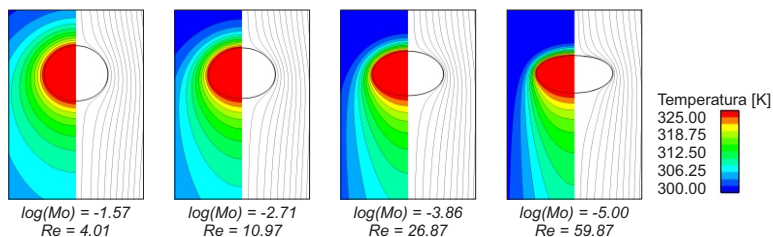
(d) $Eo = 60.0$

Como observado na Figura 5.10, quando a partícula fluida distancia-se do formato esférico, a transferência de calor é mais dependente do número de Pr . De acordo com os parágrafos acima, o campo de velocidades ao redor das partículas fluidas é afetado por seu formato e consequentemente afeta a transferência de calor na interface. Para situações em que o valor de Pr é baixo, para um mesmo Re , tem-se um baixo Pe e o transporte difusivo de energia é dominante na transferência de calor interfacial. À medida que Pr aumenta, o transporte convectivo de energia

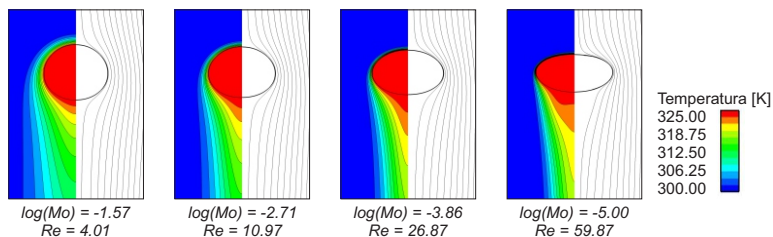
torna-se dominante e o campo de velocidades ao redor das partículas fluidas afeta de maneira mais intensa a transferência de calor. A partir do ponto em que a convecção torna-se o processo dominante de transporte de energia, o comportamento da transferência de calor local pode ser relacionado com o perfil local da velocidade tangencial na interface, como mostrado na Figura 5.7a. Conforme o número de Eo aumenta para um mesmo Re , *i.e.*, aumenta a distorção da partícula, os perfis da velocidade tangencial na região frontal e traseira começam a tornar-se distintos, com baixos valores na região traseira seguido por uma recirculação de fluido. Como o campo de velocidades ao redor das partículas fluidas esféricas não apresentam grandes diferenças entre os dois hemisférios, o número de Pr não provoca grandes mudanças na transferência de calor interfacial local. Todavia, essa conclusão é apenas válida para a análise dos perfis normalizados, uma vez que a magnitude do valor do número de Nu altera-se consideravelmente com o número de Pr , como será discutido na próxima seção.

As análises mostradas até este ponto fizeram uso dos resultados para simulações em diferentes números de Eötvös Eo com o número de Reynolds Re muito similares ($Re \approx 20,0$) e diferentes números de Prandtl Pr , revelando, com esperado, que a transferência de calor é significativamente afetada pela deformação das partículas fluidas. Como mostrado a seguir, as conclusões retiradas dos resultados obtidos para $Re \approx 20,0$ podem ser estendidas para situações com diferentes Eo e Re . A Figura 5.11 mostra os campos de temperatura e linhas de corrente ao redor de partículas para certos valores de Eo em diferentes números de Re e Pr .

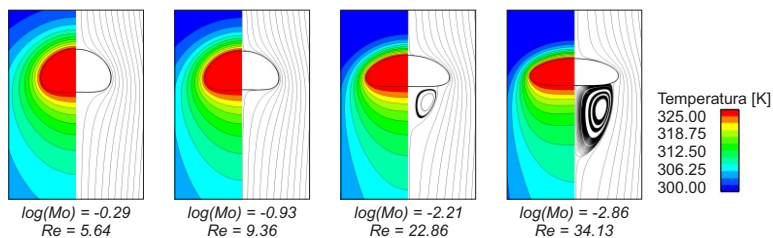
Figura 5.11 – Morfologia obtida das partículas fluidas para valores definidos de Eo e diferentes valores de Re , contornos dos campos de temperatura e linhas de corrente, após alcançar o regime permanente para $Pr = 0.50$ e $Pr = 10.0$, valores extremos de Pr utilizados neste trabalho.



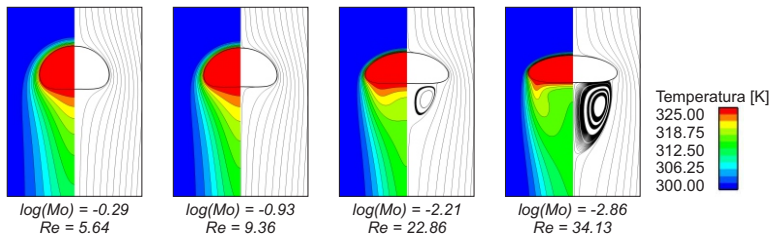
(a) $Eo = 5,0$ e $Pr = 0,50$



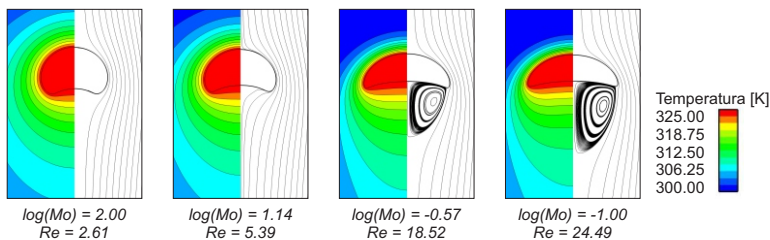
(b) $Eo = 5,0$ e $Pr = 10,0$



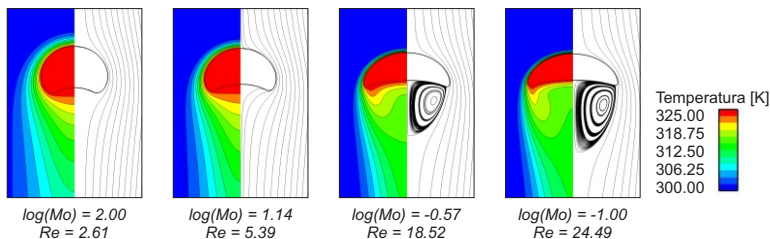
(c) $Eo = 20,0$ e $Pr = 0,50$



(d) $Eo = 20,0$ e $Pr = 10,0$



(e) $Eo = 60,0$ e $Pr = 0,50$



(f) $Eo = 60,0$ e $Pr = 10,0$

Na Figura 5.11 são observadas as alterações na espessura da camada limite térmica à medida que o número de Pr é aumentado. Nota-se o mesmo efeito quando os valores de Eo e Re aumentam (deformação das partículas fluidas), com o aparecimento de uma região de recirculação na região traseira da partícula. O efeito do número de Pr é observado de maneira marcante por meio da comparação do campo de temperaturas dos casos com Re elevados e diferentes Pr para um mesmo Eo , onde o campo de temperaturas na região traseira é influenciado pela recirculação nos casos em que $Pr = 10,0$. Com o intuito de apresentar o efeito da deformação das partículas fluidas no campo de velocidades e na transferência de calor na proximidade das mesmas, as Figuras 5.12 – 5.14 mostram os perfis da velocidade tangencial normalizada u_t^* e do Nusselt local norma-

lizado Nu_{local}^* para $Pr = 10,0$ e $Pr = 0,50$ para os casos mostrados na Figura 5.11.

Figura 5.12 – Perfis da velocidade tangencial normalizada u_t^* e do Nusselt local normalizado Nu_{local}^* para $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,0$ em diferentes valores de Re e $Eo = 5,0$.

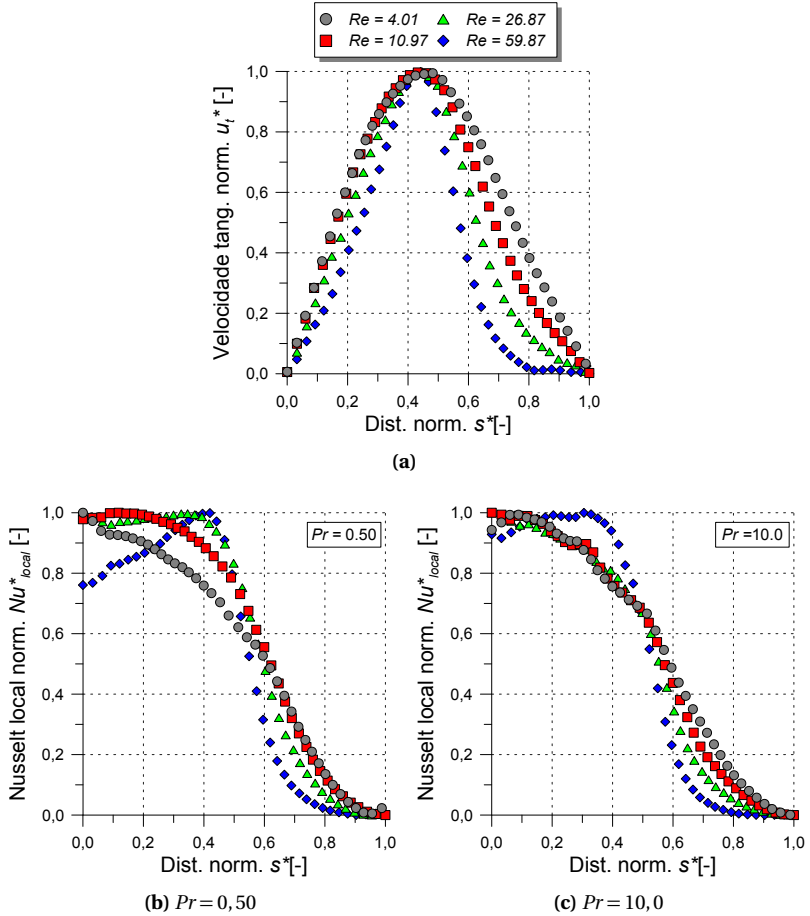


Figura 5.13 – Perfis da velocidade tangencial normalizada u_t^* e do Nusselt local normalizado Nu_{local}^* para $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,0$ em diferentes valores de Re e $Eo = 20,0$.

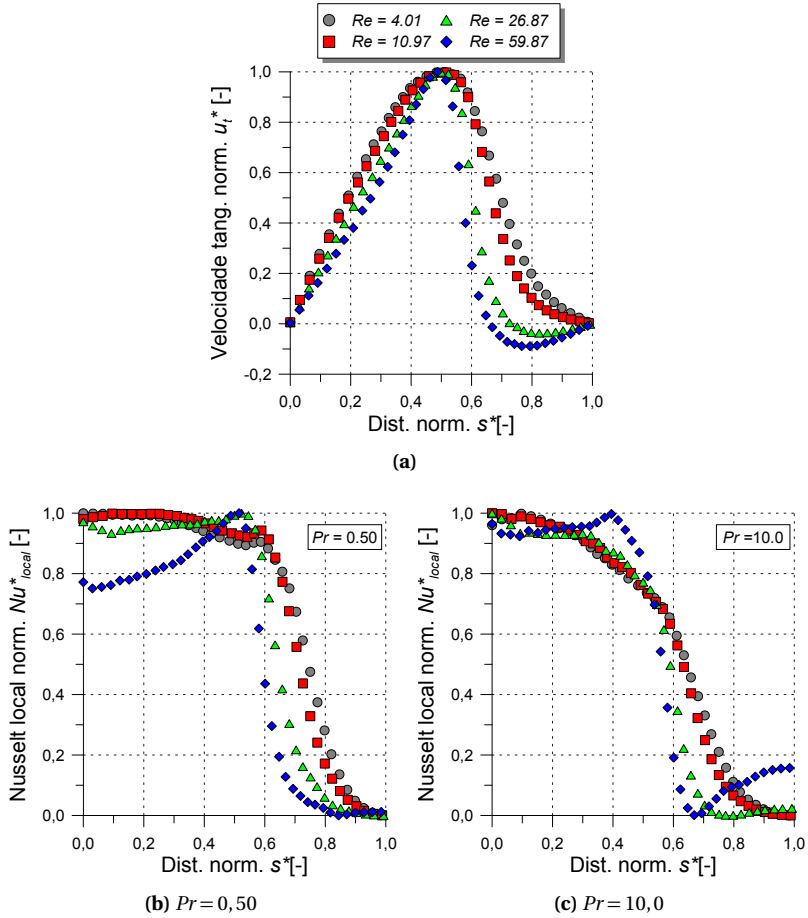
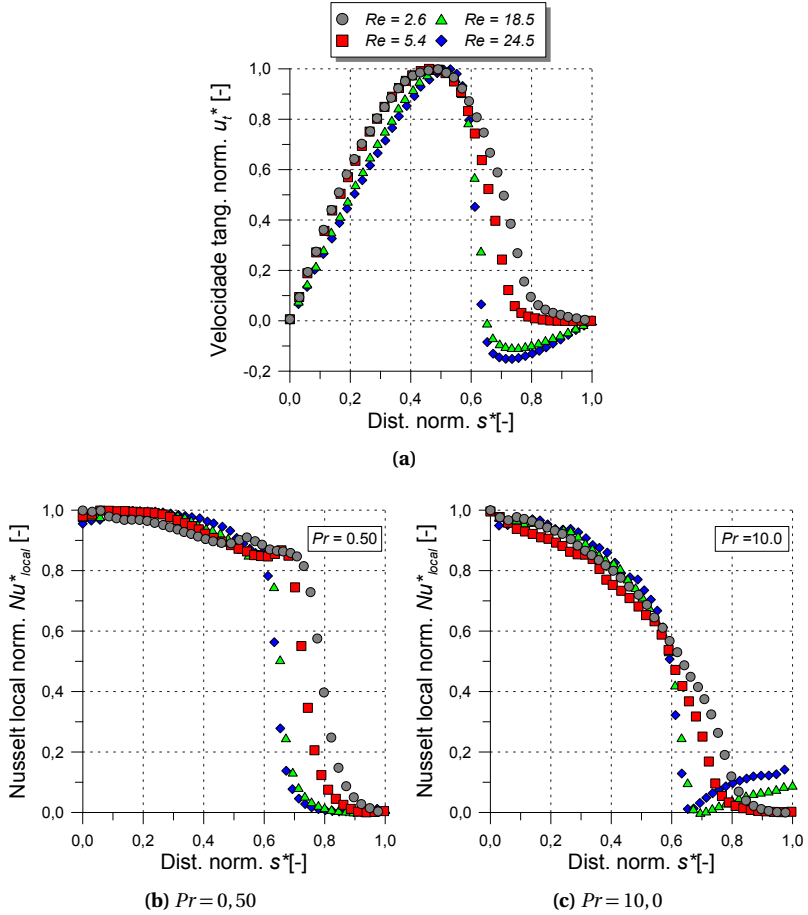


Figura 5.14 – Perfis da velocidade tangencial normalizada u_t^* e do Nusselt local normalizado Nu_{local}^* para $Pr = 0,50$ e $Pr = 10,0$ em diferentes valores de Re e $Eo = 60,0$.



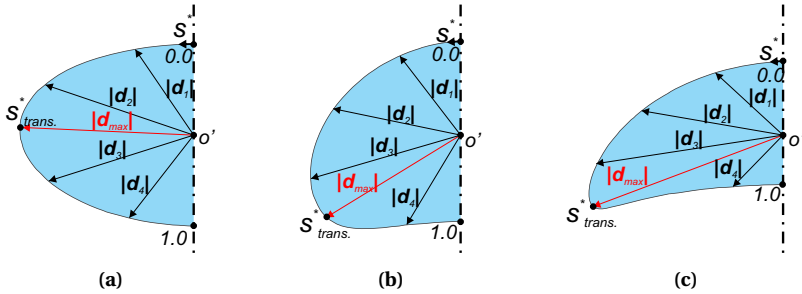
A análise das Figuras 5.12 – 5.14 revelam as mesmas conclusões obtidas a partir da análise do efeito do número de Eo e Pr para $Re \approx 20,0$. No entanto, para essas situações, com o intuito de analisar a contribuição das regiões frontal e traseiras das partículas fluidas na transferência de calor global, a análise é realizada a partir do parâmetro ψ que dá o valor percentual da transferência de calor que ocorre na porção traseira, definido

como,

$$\psi = 100,0\% \cdot \frac{\int_{s_{trans}^*}^{1,0} Nu_{local}^* ds^*}{\int_{0,0}^{1,0} Nu_{local}^* ds^*} \quad (5.14)$$

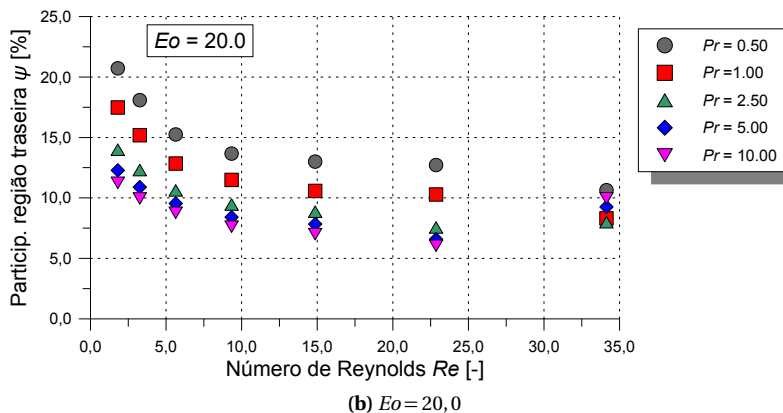
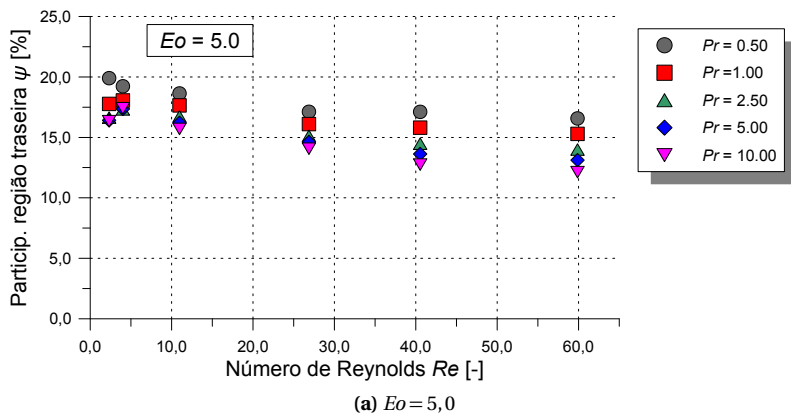
onde s_{trans}^* é o local que marca a transição entre os dois hemisférios. Este ponto, s_{trans}^* , foi definido como o ponto da interface possui a máxima distância $|d|$ entre o centro de volume da partícula fluida localizado em o' , como visto na Figura 5.15 para diferentes formatos da partícula. É importante notar que o ponto de descolamento da camada limite, denotado pelo ponto onde u_t^* é próximo de zero, não necessariamente coincide com s_{trans}^* , onde este último é definido apenas geometricamente. No entanto, o ponto de descolamento se encontrará próximo desse ponto.

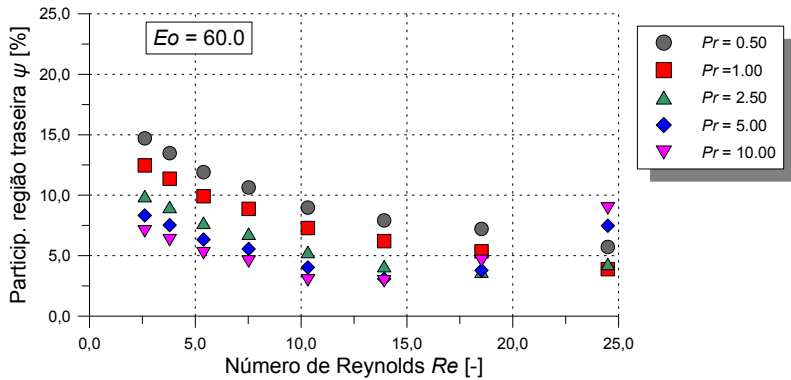
Figura 5.15 – Definição do ponto s_{trans}^* , definido como o ponto da interface possui a máxima distância $|d|$ entre o centro de volume da partícula fluida localizado em o' .



A Figura 5.16 mostra contribuição da região traseira na transferência de calor global para diferentes níveis de deformação (números de Eo) e Pr .

Figura 5.16 – Importância da região traseira na transferência de calor local para diferentes níveis de deformação (números de Eo) e Pr .





(c) $Eo = 60,0$

Na Figura 5.16 é observado que a região traseira contribui, em um caso limite, com cerca de 25% da transferência de calor total ao redor da partícula fluida e que a região é influenciada pela deformação da interface e pelo número de Pr . Sobre o número de Pr , à medida que seu valor é aumentado, há uma diminuição da importância da região traseira na transferência de calor total para todos os regimes de escoamento (Re) mostrados em $Eo = 5,0$. Entretanto para as outras situações, $Eo = 20,0$ e $Eo = 60,0$, há o aparecimento de um ponto de inflexão nas curvas à medida que o valor de Pr é aumentado. A ocorrência destes pontos de inflexão pode ser atribuída a presença das recirculações na região traseira da partícula fluida, como mostrado nas Figuras 5.13c e 5.14c, que alteram a transferência de calor na região quando os valores de Pr são mais elevados, conforme previamente discutido.

Um ponto interessante obtido da análise mostrada na Figura 5.16 é o aumento da participação da região traseira na transferência de calor, conforme aumento do número de Pr , para situações em que o número de Re é elevado e a partícula encontra-se deformada. Esta análise cobre importância quando é analisado o fenômeno da transferência de massa onde o parâmetro análogo ao Pr , o número de Schmidt Sc , pode alcançar valores de ordem de grandeza de até $Sc = O(1000)$, embora tais valores não sejam atingidos nas análises desenvolvidas neste trabalho. Nesses casos alguns trabalhos na literatura utilizam métodos multi-escala (ver, por exemplo, (Aboulhasanzadeh *et al.*, 2012, 2013; Bothe & Fleckenstein, 2013)), que, por serem baseados no uso de soluções conhecidas prove-

nientes da teoria da camada limite, não predizer de maneira correta a transferência de massa na porção traseira da partícula fluida, dando origem a discrepâncias nos coeficientes globais de transferência de massa interfacial.

5.3 Análise Global da Transferência de Calor

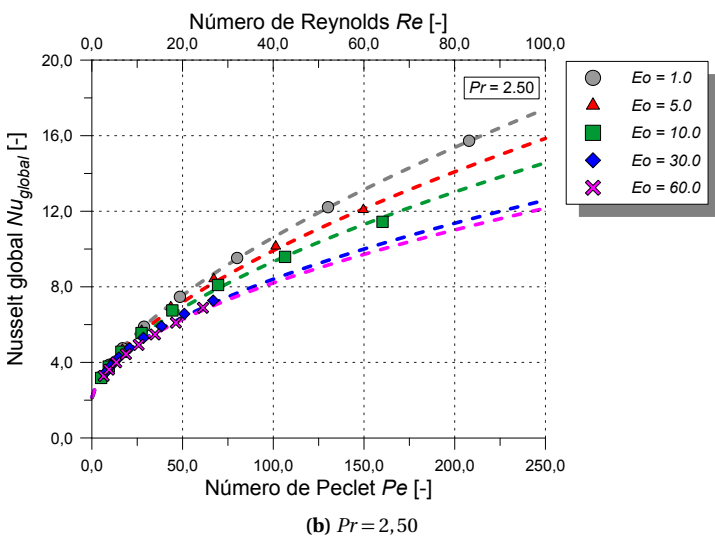
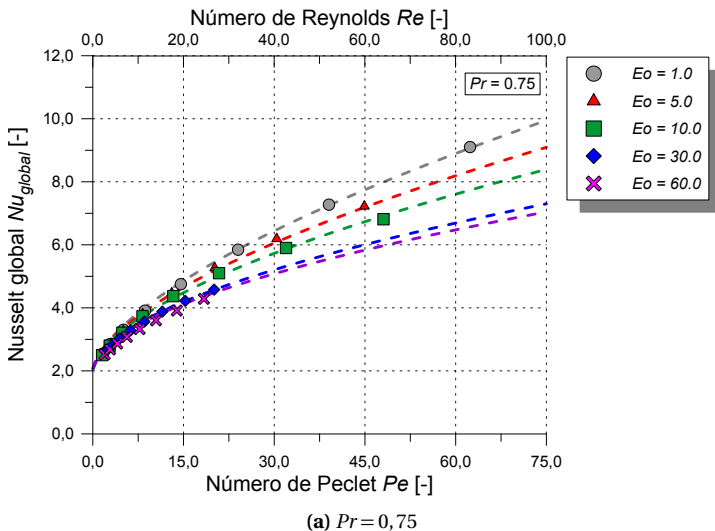
Nesta seção o efeito da deformação das partículas fluidas na transferência de calor interfacial é analisado a partir de um ponto de vista global, através das mudanças no número de Nusselt global Nu_{global} , parâmetro que quantifica a transferência de calor e é utilizado como variável dependente na correlação desenvolvida no decorrer deste capítulo. Na seção anterior, que apresenta os resultados da transferência de calor interfacial local, a análise realizada teve um caráter qualitativo, uma vez que foi baseada nos resultados de perfis normalizados. Nesta seção, os resultados apresentados são provenientes do balanço de energia global descrito no Capítulo 3 e calculados através da Equação (3.14), sendo independentes da definição da posição da interface e do cálculo do gradiente de temperatura local. Apesar disso, de acordo com o que foi discutido na análise local da transferência de calor, pode-se concluir que o transporte de energia entre as duas fases, e por sua vez o valor de Nu_{global} , é uma função das grandezas adimensionais dos números de Eötvös (Eo), Reynolds (Re) e Prandtl (Pr), de forma que,

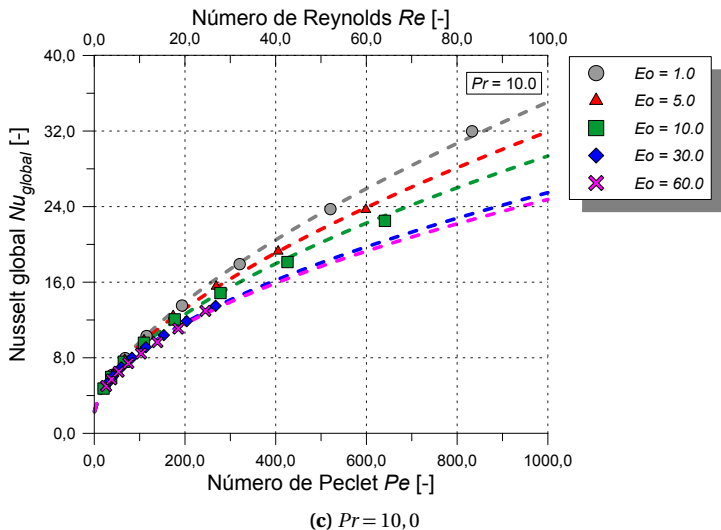
$$Nu_{global} = f(Eo, Re, Pr) \quad (5.15)$$

Assim, a Figura 5.17 mostra, através de pontos, o efeito do número de Eötvös (Eo) nos gráficos de Nu_{global} v.s. Pe^2 para $Pr = 0,75$, $Pr = 2,50$ e $Pr = 10,0$.

²O número de Peclet é definido como Pe ($Pe = Re \cdot Pr$).

Figura 5.17 – Efeito do número de Eötvös (Eo) nas curvas de Nu_{global} v.s. Pe para diferentes valores de Pr . Os pontos mostram os resultados obtidos das simulações numéricas e as linhas tracejadas correspondem a correlação proposta.





Os resultados da Figura 5.17 mostram que a distorção das partículas fluidas, em relação ao formato esférico, resultam em uma diminuição do coeficiente global de transferência de calor interfacial. Esse resultado é condizente com o fato de que, conforme as partículas se distorcem, a região posterior contribui cada vez menos à transferência de calor interfacial. Além do mais, é preciso relembrar que o valor de Nu_{global} é calculado a partir da Equação (3.14), que utiliza um diâmetro d_b baseado no volume das partículas fluidas, considerando o diâmetro de uma esfera equivalente e permanecendo constante em todos os casos simulados. Desta forma, o resultado de Nu_{global} incorpora de maneira incompleta a alteração da superfície de contato, pois no balanço global realizado na Equação (3.14), o fluxo médio de calor na interface é calculado com base na área da interface das partículas distorcidas, calculada a partir de uma iso-superfície de α_b . Assim, o resultado mostrado na Figura 5.17 deve ser corrigido de forma a incorporar de maneira consistente o efeito da deformação da partícula fluida no aumento da área interfacial (ou densidade de área interfacial, que é o parâmetro utilizado no Modelo de Dois Fluidos). Entretanto, uma melhor compreensão dos resultados mostrados nessas curvas é alcançada a partir da análise local da transferência de calor. Das conclusões dessa análise local, viu-se que à medida as partículas se distanciam de um formato esférico, grande parte da transferência de calor ocorre na porção frontal da partícula, em função da estagnação do fluido

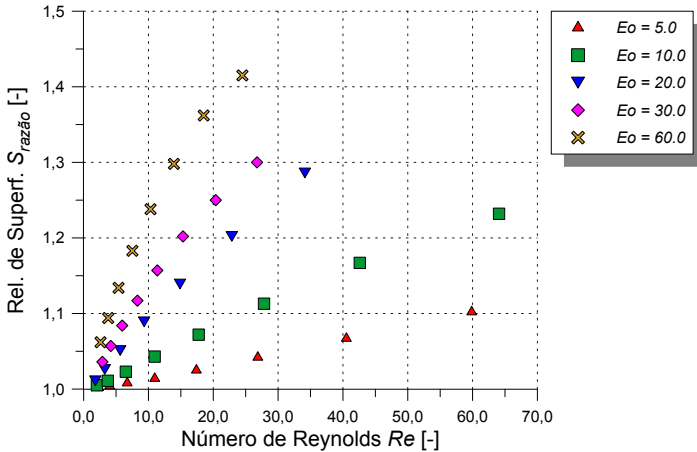
na porção traseira. Apesar da parcela de fluxo de calor transferido nesta região, em partículas fortemente distorcidas, tornar-se cada vez maior conforme aumento do número de Pr , para os valores utilizados nesse trabalho, ela ainda não é capaz de compensar esse efeito, resultando em uma diminuição da transferência de calor total da partícula fluida.

A deformação da partícula fluida provoca alterações na área superficial de contato entre as duas fases, como visto anteriormente nas ilustrações das morfologias obtidas a partir dos casos simulados (Figura 5.1). É possível observar claramente que o aumento dos números de Eo e Re resultam em um aumento da área de contato entre as duas fases. A variável utilizada para correlacionar essa alteração, sendo definida como a relação da área superficial $S_{interface}$ é obtida do resultado numérico para uma iso-superfície de $\alpha_b = 0,5$ e da área superficial de uma esfera equivalente $S_{esfera} = \pi d_b^2$ com o mesmo volume. O parâmetro já foi introduzido no Capítulo 4 na Equação (4.1), mas é mostrado aqui novamente por conveniência,

$$S_{razão} = \frac{S_{interface}}{S_{esfera}} \quad (5.16)$$

A variação de $S_{razão}$ com o número de Re para diferentes valores de Eo é mostrada na Figura 5.18.

Figura 5.18 – Valores da relação de superfícies $S_{razão}$ para diferentes números de Eo e Re .



Como esperado, o resultado das curvas mostradas na Figura 5.18 mostram um aumento da área interfacial mediante aumento do número

Eo e Re em virtude do balanço entre as forças de inércia, viscosas e de tensão superficial.

Das Figuras 5.17 e 5.18, torna-se claro que a formulação de uma correlação de fechamento para a transferência de calor global no contexto do Modelo de Dois Fluidos, deve levar em conta também uma relação para esse aumento da área interfacial. Desse modo, uma vez que a densidade de área interfacial no modelo é sempre computada baseando-se em partículas esféricas, esse valor deve ser corrigido levando em consideração a deformação das partículas, como é discutido na seção seguinte.

5.4 Desenvolvimento de uma Correlação para Transferência de Calor Interfacial

De acordo com o discutido nas seções precedentes, a correlação para a transferência de calor interfacial deve ser composta de uma equação para correlacionar os fenômenos descritos na Figura 5.17 e uma segunda correção para a alteração da área interfacial, como visto na Figura 5.18. Portanto, o desenvolvimento das duas parcelas da correlação é mostrado em duas seções distintas, uma primeira para a transferência de calor e outra para a correção da área interfacial, apresentadas respectivamente nas Seções 5.4.1 e 5.4.2.

5.4.1 Correlação Proposta para a Transferência de Calor e de Massa Interfacial

Análises baseadas na teoria da camada limite para transferência de calor externa resultam na clássica forma do número de Nusselt Nu como função do número de Reynolds Re e Prandtl Pr , na forma,

$$Nu = a Re^b Pr^c \quad (5.17)$$

Para o escoamento ao redor de uma esfera o valor de 2,0 é adicionado na Equação (5.17) com a finalidade de representar o valor resultante da solução puramente difusiva da equação da conservação da energia, isto é, quando $Re \rightarrow 0$. Baseando-se na simplicidade e o sentido físico adequado dessa equação, a correlação proposta neste trabalho para a transferência de calor interfacial, é baseada na mesma, procurando apenas incorporar

o efeito do número de Eo , parâmetro adimensional relacionado a distorção do formato das partículas, como já largamente discutido. Assim, a forma geral da correlação proposta é,

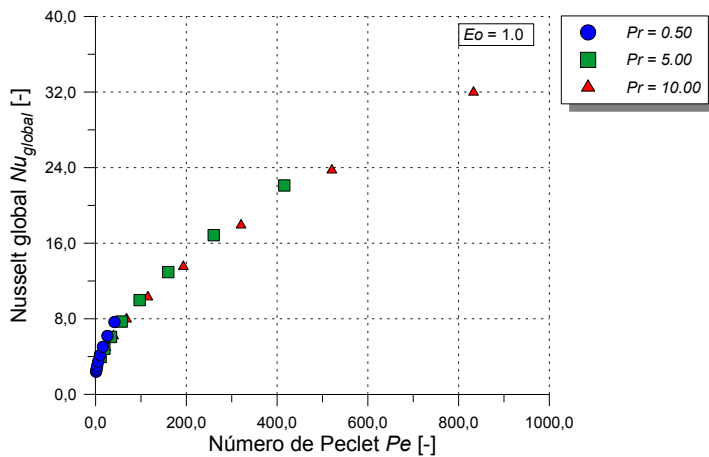
$$Nu_{global} = 2,0 + a Re^{b(Eo)+c(Eo)} Pr^{b(Eo)} \quad (5.18)$$

ou, usando o número de Peclet Pe ,

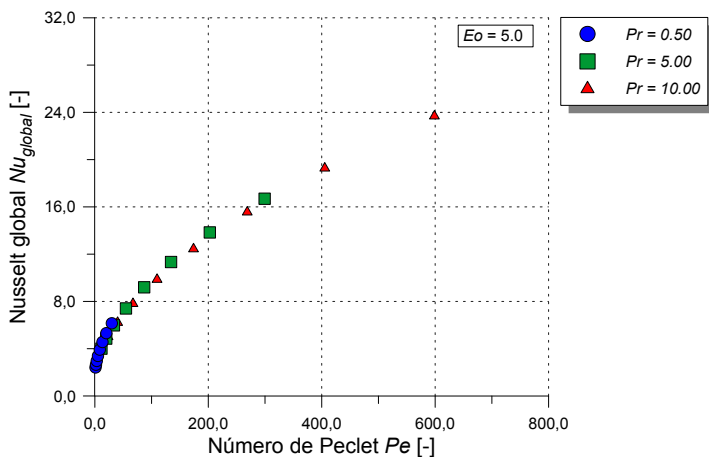
$$Nu_{global} = 2,0 + a Pe^{b(Eo)} Re^{c(Eo)} \quad (5.19)$$

Nas Equações (5.18) e (5.19), os expoentes b e c foram definidos como sendo função de Eo para incorporar o efeito da deformação da partícula fluida, enquanto que o coeficiente a foi mantido constante no procedimento de regressão, uma vez que, após um longo estudo das diversas possibilidades de regressão, foi observado que este coeficiente tem pouca dependência desse parâmetro. A forma da correlação dada pela Equação (5.19) (ao invés da forma da Equação (5.18)) permitiu uma correlação fechada para os parâmetros b e c como função de Eo , para todas as faixas de Re , Pr e Pe considerados nesse trabalho. Isto pode ser melhor visualizado, em função do comportamento dos valores de Nu_{global} e Pe para diferentes valores de Eo e Pr , apresentado na Figura 5.19. Caso outra abordagem fosse utilizada, seria necessário o desenvolvimento de correlações separadas para diferentes faixas de Pr e Re , tornando a implementação da correlação um processo mais trabalhoso.

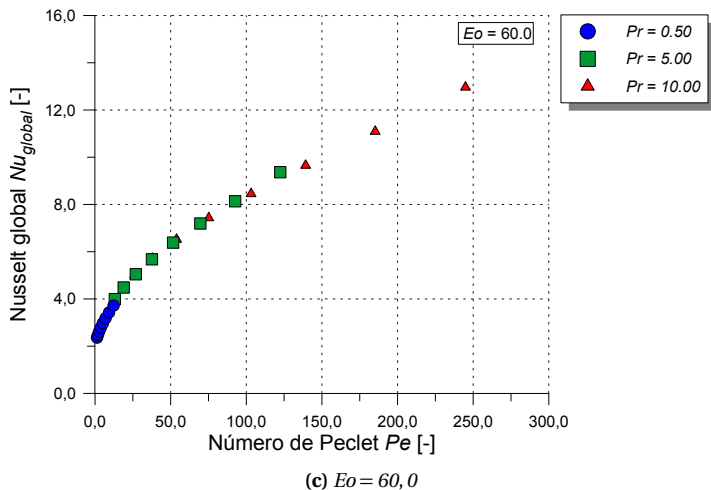
Figura 5.19 – Comportamento do valores de Nu_{global} e Pe para diferentes valores de Eo e Pr .



(a) $Eo = 1,0$



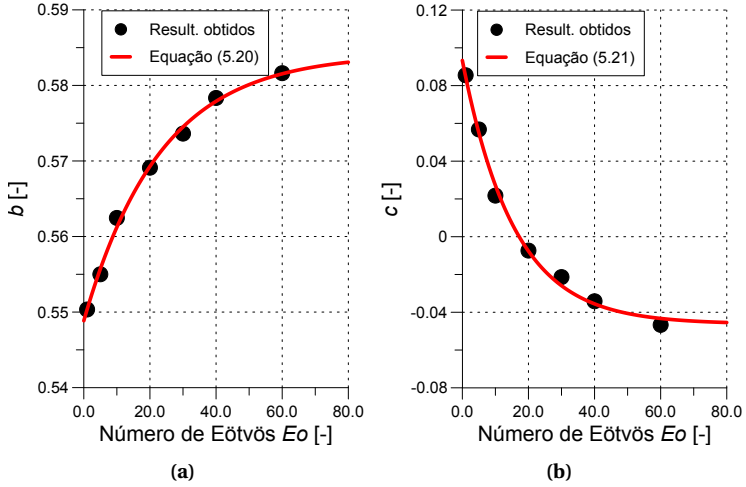
(b) $Eo = 5,0$



Na Figura 5.19 é possível observar que, enquanto o número de Pr tem pequena influência sobre os resultados para partículas esféricas, as curvas para os diferentes valores de Pr tendem a colapsar conforme aumento do número de Eo , ou seja, à medida que começam a se distorcer do formato esférico. Contudo, isso não indica que o valor de Nu_{global} torne-se independente de Pr , uma vez que o valor é incorporado no número de $Pe = Re \cdot Pr$, mas sim que expressar a correlação como função do número de Pe ao invés de usar os valores de Re e Pr , facilita o procedimento de ajuste dos parâmetros a , b e c em todo o intervalo considerado.

Os valores de a , b e c foram encontrados através da técnica de ajuste de curvas *chi-square minimization*, através do algoritmo de Levenberg-Marquardt para ajuste dos valores nos *loops* iterativos, considerando os dados obtidos para todas as faixas de Re , Pr e Eo . Dos valores calculados, a apresentou pequenas variações para todos os diferentes Eo e assim um valor constante de $a = 0,50$ foi adotado. Para os diferentes números de Eo , a Figura 5.20 apresenta o comportamento dos expoentes b e c .

Figura 5.20 – Valores obtidos e curvas ajustadas para $b(Eo)$ e $c(Eo)$, expo-
nentes das Equações (5.18) e (5.19).



Os valores mostrados na Figura 5.20 foram facilmente aproximados por uma curva exponencial, resultando no seguinte conjunto de equações,

$$b(Eo) = -0,0353 \exp(-Eo/23,175) + 0,584 \quad (5.20)$$

e

$$c(Eo) = 0,140 \exp(-Eo/15,567) - 0,0462. \quad (5.21)$$

A correlação obtida para a transferência de calor, considerando a variação dos expoentes pelo número de Eo através das Equações (5.20) e (5.21), é mostrada na Figura 5.17 juntamente com os resultados das simulações.

Na Figura 5.17, o máximo desvio entre os resultados numéricos e a correlação proposta, em toda faixa dos parâmetros considerados, foi de aproximadamente 8,0%. Apesar da possibilidade desse máximo desvio ser reduzido por meio do ajuste de curva em diferentes intervalos, tal procedimento resultaria em diferentes correlações para diferentes faixas de valores dos parâmetros considerados, gerando complicações na sua implementação no contexto no Modelo de Dois Fluidos. Por isso, manteve-se a correlação da maneira apresentada.

5.4.2 Correção da Área Interfacial

Relações de fechamento para a troca de calor e de massa interfacial no Modelo de Dois Fluidos geralmente incorporam a densidade de área interfacial considerando as partículas como esféricas a partir de um diâmetro médio, parâmetro de entrada introduzido pelo usuário ou calculados a partir de modelos fenomenológicos, como dos balanços de quebra e coalescência em modelos de balanço populacional em escoamentos polidispersos. Dessa forma, como o número de Nusselt global Nu_{global} foi avaliado sem levar em consideração a deformação das partículas, na escala de comprimento utilizada, e seu efeito na área interfacial, a densidade de área interfacial necessita ser corrigida no cálculo da transferência de calor ou massa interfacial global.

Como mostrado nas seções precedentes, o efeito do aumento da área interfacial foi quantificado pelo parâmetro $S_{razão}$, função dos valores de Re e Eo . Desse modo, a seguinte equação foi proposta para correlacionar esse efeitos,

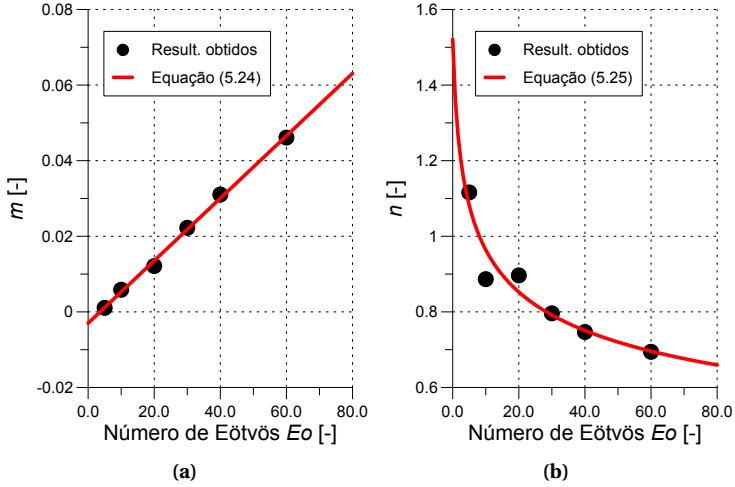
$$S_{razão}(Re, Eo) = 1,0 + m(Eo) \cdot Re^{n(Eo)}, \text{ para } Eo \geq 5,0 \quad (5.22)$$

em que 1,0 representa o valor para uma partícula fluida perfeitamente esférica, encontrada quando $Re \rightarrow 0$, e os parâmetros m e n são função de Eo . Os valores de $Eo < 5,0$ não foram computados no cálculo de m e n , uma vez que esses valores são aproximadamente 1,0 em todas as situações. Assim, pode-se dizer que

$$S_{razão}(Re, Eo) = 1,0, \text{ para } Eo < 5,0 \quad (5.23)$$

O procedimento de regressão para encontrar os parâmetros m e n foi o mesmo utilizado no desenvolvimento da correlação para a transferência de calor, lembrando que os valores dependem apenas dos parâmetros hidrodinâmicos, isto é, não há dependência de Pr . Assim, os valores de m e n são plotados para os diferentes valores de Eo na Figura 5.21.

Figura 5.21 – Valores obtidos e curvas ajustadas para $m(Eo)$ e $n(Eo)$, coeficientes da Equação (5.22).



Os valores mostrados na Figura 5.21 foram aproximados a partir de uma aproximação linear para m e outra exponencial para n , dando origem, respectivamente a

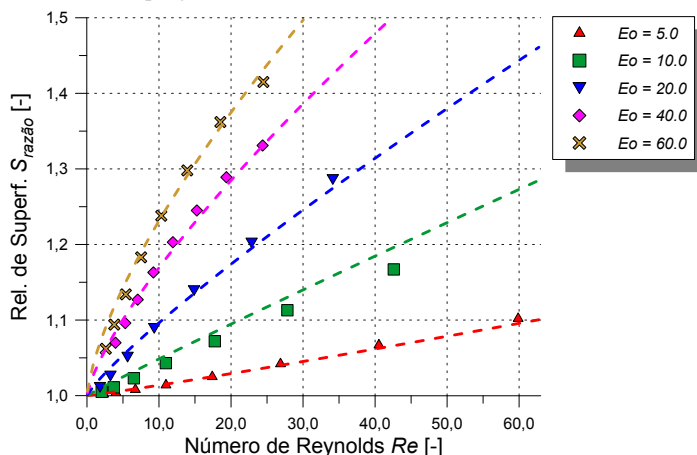
$$m(Eo) = -2,99 \cdot 10^{-3} + 8,26 \cdot 10^{-4} \cdot Eo \quad (5.24)$$

e

$$n(Eo) = 1,521(1,0 + Eo)^{-0,19016} \quad (5.25)$$

O resultado da correlação proposta para quantificar o efeito dos números de Eo e Re na área interfacial através de $S_{razão}$ é mostrado na Figura 5.22, juntamente com os valores obtidos das simulações.

Figura 5.22 – Valores da relação de superfícies $S_{razão}$ para diferentes números de Eo e Re . Os pontos representam os valores numéricos e as linhas tracejadas correspondem a correlação dada pela Equação (5.22)



Da Figura 5.22, observa-se que os valores de $S_{razão}$ calculados pela correlação definida na Equação (5.22) concordam bem com os dados numéricos, resultando em um desvio máximo de 4,5%.

5.5 Aplicação para um Caso de Referência através do Modelo de Dois Fluidos

Para verificar os efeitos da deformação das partículas fluidas na transferência de calor interfacial, a correlação proposta para a transferência de calor e a correção para área interfacial foram introduzidas no contexto do Modelo de Dois Fluidos (1D), e um simples caso de um reator do tipo coluna de bolhas foi analisado, de modo similar ao modelo apresentado no trabalho de Singh & Majumder (2011). No Modelo de Dois Fluidos, as equações governantes são obtidas através da aplicação consistente do processo de média no processo local instantâneo, resultando num conjunto de equações que pode ser resolvido mediante utilização de relações de fechamento (Ishii & Hibiki, 2011). O modelo empregado por (Singh & Majumder, 2011) é aqui simplificado, resultando em um reator do tipo coluna de bolhas idealizado, em que o processo de transferência de massa ocorre sem reações químicas, o campo de velocidades pode ser

considerado como plenamente desenvolvido e o escoamento é tratado como unidimensional. A fase dispersa é composta de apenas um componente (aqui componente A) que é transferido através da interface para a fase contínua e deste modo, a fração mássica na fase dispersa mantém-se constante e igual a unidade. Além disso, apesar da fração volumétrica da fase dispersa variar em função da transferência de massa, esse parâmetro foi considerado constante, o que pode ser justificado em função da elevada razão de densidades das duas fases (ver Tabela 5.6). Apesar das simplificações do modelo, é importante enfatizar que o objetivo da aplicação nesse caso de referência é ilustrar os efeitos da deformação da partícula na transferência interfacial, comparando os fluxos interfaciais calculados a partir de correlações usuais para partículas esféricas e das correlações aqui propostas, e não resolver um problema real de aplicação.

A partir das simplificações mencionadas acima, a equação para o transporte de massa resulta para a fase contínua,

$$\frac{d(\rho_c w_c \alpha_c x_c^A)}{dz} = \rho_c F_{cd}^A \quad (5.26)$$

e para fase dispersa,

$$\frac{d(\rho_d w_d \alpha_d x_d^A)}{dz} = \rho_d F_{dc}^A \quad (5.27)$$

em que w é a velocidade axial, α é a fração volumétrica de cada fase e x^A é a fração mássica do componente "A". A transferência de massa interfacial no Modelo de Dois Fluidos é expressa pelo fluxo mássico interfacial F_{ij}^A , dado por,

$$F_{cd}^A = a_i''' h_m (x_c^A - He x_d^A) \quad (5.28)$$

$$F_{dc}^A = a_i''' h_m (He x_d^A - x_c^A) \quad (5.29)$$

onde He é o coeficiente de Henry, h_m é o coeficiente de transferência de massa e a_i''' é a densidade de área interfacial. A densidade de área interfacial representa a quantidade de área interfacial por unidade de volume e é geralmente calculada a partir da hipótese que a fase dispersa é composta por partículas fluidas esféricas. Assim, para um formato esférico,

$$a_i''' = \alpha_b \frac{S_{esfera}}{V_{esfera}} = \alpha_b \frac{\pi d_b^2}{\pi d_b^3/6} = \frac{6\alpha_b}{d_b}. \quad (5.30)$$

Entretanto, à medida que as partículas se distorcem, a densidade de área interfacial aumenta e a consequentemente área de contato entre as duas fases. Por esse motivo, como proposto na seção anterior (e também no trabalho de Figueroa-Espinoza & Legendre (2010)) é necessário corrigir esse parâmetro, introduzindo-o da seguinte forma,

$$a_i''' = \alpha_b \frac{S_{interface}}{V_{esfera}} = \alpha_b \frac{S_{interface}}{V_{esfera}} \frac{S_{esfera}}{S_{esfera}} = \alpha_b \frac{S_{esfera}}{V_{esfera}} \frac{S_{interface}}{S_{esfera}} \quad (5.31)$$

Da definição da variável $S_{razão}$ encontrada na Equação (4.1) e lembrando que o parâmetro é proposto nesse trabalho como função de Eo e Re , como visto na Seção 5.4.2, tem-se

$$a_i''' = \alpha_b \frac{S_{esfera}}{V_{esfera}} S_{razão} = \frac{6\alpha_b}{d_b} S_{razão}(Eo, Re) \quad (5.32)$$

O coeficiente de transferência de massa h_m é calculado através da analogia entre a transferência de calor e massa (Clift *et al.*, 2013),

$$Sh = \frac{h_m d_b}{D_c^{mass}} \leftrightarrow Nu = \frac{h d_b}{k_c}, \quad (5.33)$$

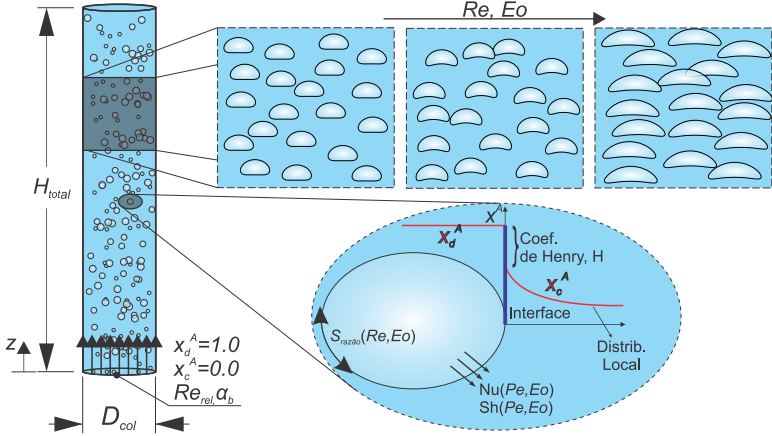
em que D_c^{mass} é a difusividade mássica da fase contínua.

A partir deste desenvolvimento, a Equação (5.28) pode ser re-escrita como função de Eo , Re e Sc , incorporando agora os efeitos da deformação da partícula fluida, sendo

$$F_{cd}^A(Pe, Eo) = \frac{6\alpha_b D_c^{mass} S_{razão}(Eo, Re) Sh(Eo, Re, Sc)}{d_b^2} (x_c^A - He x_d^A). \quad (5.34)$$

O esquema do reator do tipo coluna de bolhas com as condições de contorno do caso de referência proposto e uma representação esquemática da distribuição local das frações mássicas nas proximidades da interface é mostrado na Figura 5.23.

Figura 5.23 – Esquema do reator do tipo coluna de bolhas e condições de contorno. A distribuição local das frações mássicas nas proximidades da interface é mostrada, esquematicamente, no detalhe.



É importante lembrar que o número de Reynolds Re utilizado para esse caso de referência, e nas correlações, é calculado a partir da diferença de velocidades entre a fase contínua e dispersa, sendo ele

$$Re_{rel} = \frac{\rho_c (w_c - w_d) d_b}{\mu_c} \quad (5.35)$$

Para comparar o efeito da introdução da correlação proposta para a transferência de massa e a correção de área interfacial, três situações foram consideradas:

1. No primeiro caso utiliza-se uma correlação para transferência de massa que considera uma partícula fluida perfeitamente esférica ($S_{razão} = 1,0$), desconsiderando os efeitos da deformação, apresentando a prática mais comum em problemas de engenharia. A correlação de Takemura & Yabe (1998) (Equação (2.33)), $Sh_{esférico}(Re, Sc)$, é usada nesse caso.
2. Para a segunda situação, a correlação proposta para transferência de massa, $Sh_{proposto}(Eo, Re, Sc)$, é usada, porém não é considerado o efeito do aumento da área interfacial em função da deformação das partículas, ou seja, considera-se que $S_{razão}(Eo, Re) = 1,0$ na Equação (5.34).

3. Finalmente, a correlação proposta para transferência de calor/massa, $Sh_{proposto}(Eo, Re, Sc)$, é utilizada em conjunto com a correção de área interfacial $S_{razão}(Eo, Re)$, i.e., Equação (5.34).

As três situações foram simuladas com um número de Reynolds Re_{rel} na faixa de 5,0 a 60,0 e número de Eötvös Eo entre 1,0 e 60,0, com as propriedades físicas dos fluidos e parâmetros geométricos mostrados na Tabela 5.6.

Tabela 5.6 – Propriedades físicas dos fluidos e parâmetros geométricos do reator do tipo coluna de bolhas utilizado como caso de referência.

Parâmetro	Valor
Número de Morton, $\log(Mo)$	−1,78
Densidade, ρ_c [kg/m ³]	862,0
Relação de densidades, γ	$1,42 \times 10^{-3}$
Número de Schmidt, Sc	10,0
Coefficiente de Henry, He	1,2
Fração volumétrica de gás, α_b	0,10
Diâmetro da coluna de bolhas, D_{col} [m]	0,30
Aceleração da gravidade, g [m/s ²]	9,8

Na Tabela 5.6, é possível observar que as propriedades da fase contínua resultam em um número de Morton (Mo) elevado, em função da alta viscosidade definida. Essa escolha foi baseada na faixa de Re consideradas neste trabalho para a formulação das correlações, em que o limite máximo de Re apresenta um valor moderado, correspondente a aqueles existentes em escoamentos em fluidos com viscosidades relativamente altas.

A altura do reator não foi especificada, visto que ela é definida para cada caso como a posição onde as frações mássicas das fases dispersa e contínua atingem o equilíbrio ($x_d^A = He x_c^A$). De fato, os valores resultantes da altura necessária para o estado de equilíbrio, H_{total} , é um dos principais parâmetros de projeto desse tipo de aplicação, e são comparados para as três situações previamente mencionadas. Ademais, os perfis da fração mássica e os fluxos interfaciais ao longo da altura da coluna, calculados nos três casos, também são comparados.

A fração mássica local ao longo da coordenada axial z da coluna para a situação em que $Eo = 60,0$ e $Re_{rel} = 40,0$ é mostrada na Figura 5.24,

enquanto que a Figura 5.25 apresenta os perfis do fluxo interfacial F_{cd}^A considerando os três casos de comparação propostos.

Figura 5.24 – Fração mássica ao longo da coordenada axial z da coluna para a situação em que $Eo = 60,0$ e $Re_{rel} = 40,0$ nos três casos de comparação propostos.

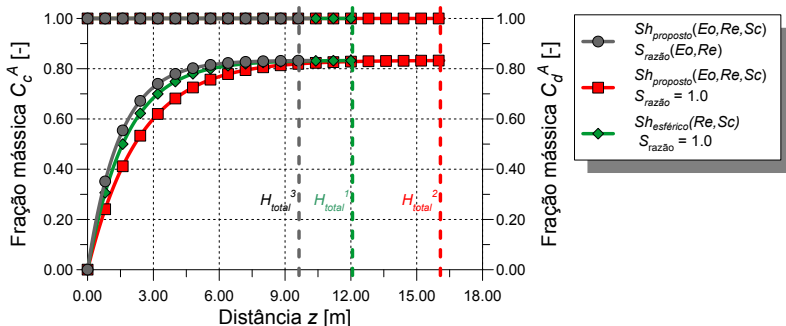
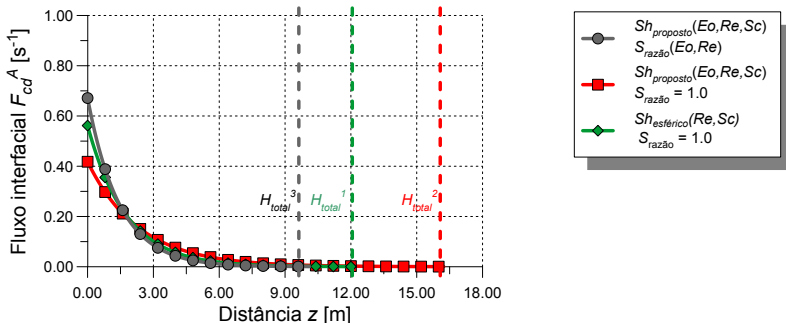


Figura 5.25 – Fluxo interfacial local ao longo da coordenada axial z da coluna para a situação em que $Eo = 60,0$ e $Re_{rel} = 40,0$ nos três casos de comparação propostos.

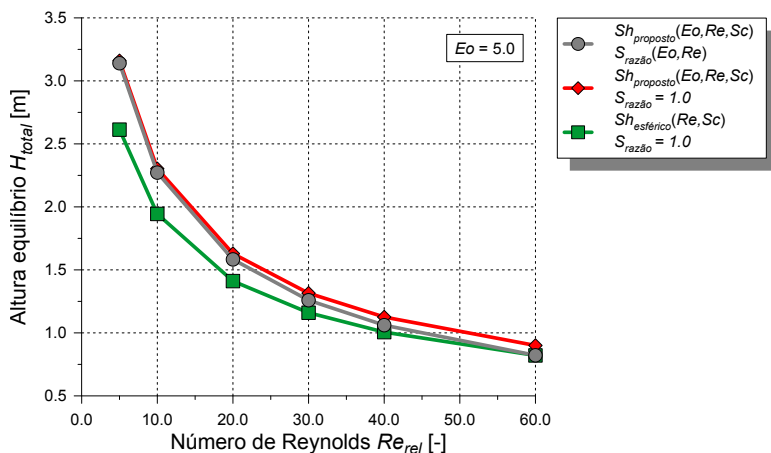


De acordo com as Figuras 5.24 e 5.25, para situação em que as bolhas apresentam um formato extremamente distorcido, a distribuição das frações mássicas são consideravelmente influenciadas pelo uso da correlação proposta para o coeficiente de transferência de massa. Além disso, o valor necessário de H_{total} para o equilíbrio também sofre alterações. Observa-se também que a correção da área interfacial, proposta na Equação (5.22) age no sentido contrário da correlação proposta para a transferência de massa, reduzindo a distância necessária para o equilíbrio e dando origem a um valor de H_{total} mais próximo daquele calculado a partir do uso da correlação de Takemura & Yabe (1998), isto é, considerando

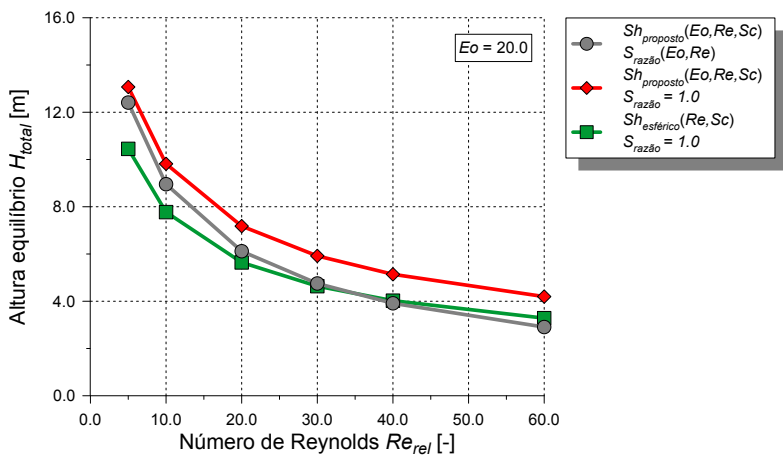
partículas esféricas. Quando as três situações consideradas para o estudo desse caso de referência são comparadas sob a perspectiva da Figura 5.25, percebe-se que há diferenças nesses perfis ao longo da coluna com mudanças no fluxo interfacial mássico máximo e mínimo em determinada posição. Essas mudanças ao longo da distância e a variação dos valores de mínimo e máximo ocorrem pelo fato da fração mássica na fase dispersa permanecer constante, visto que a quantidade total de massa transferida é a mesma e a área abaixo das curvas da Figura 5.25 deve ser igual em todas as três situações.

Para melhor compreender e visualizar o efeito do uso da correlação proposta para o coeficiente de troca interfacial e da correção para a área interfacial, a distância necessária para atingir a condição de equilíbrio H_{total} é plotada para diferentes valores de Re_{rel} e Eo na Figura 5.26. A ilustração mostra as curvas para as três situações propostas nesse estudo comparativo.

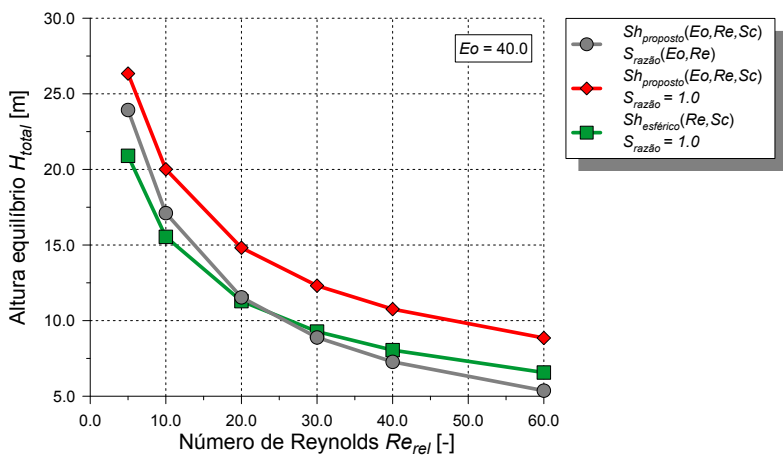
Figura 5.26 – Efeito do número de Eo na distância necessária para atingir a condição de equilíbrio H_{total} em diferentes valores de Re .



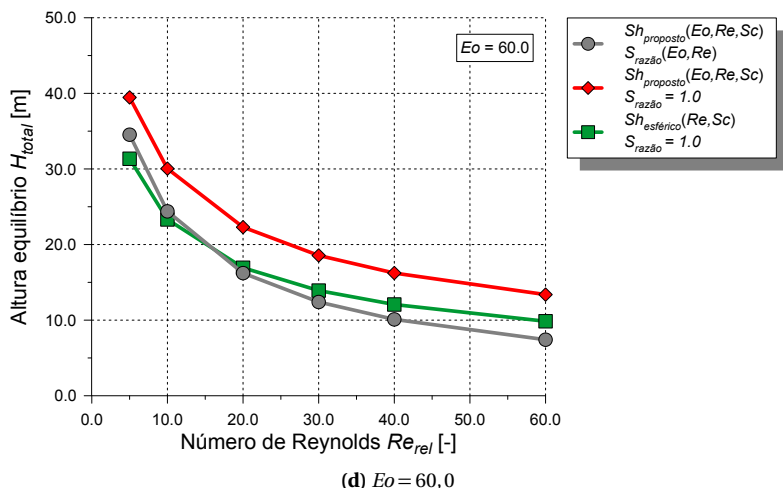
(a) $Eo = 5,0$



(b) $Eo = 20,0$



(c) $Eo = 40,0$



A Figura 5.26a mostra que a correção de área interfacial só afeta os valores de alto Re_{rel} , uma vez que nessa região o efeito do aumento da área interfacial é significativo. Contudo, na região de baixo Re_{rel} , a correlação para partículas esféricas de Takemura & Yabe (1998) prevê um menor fluxo de massa, mas à medida que Re_{rel} é acrescido essa diferença torna-se menor. À medida que o número de Eo é aumentado, Figuras 5.27b – 5.27c, os efeitos da distorção no fluxo de massa tornam-se mais significantes e a correlação para uma partícula fluida esférica superestima o fluxo mássico (a distância para as duas fases atingir o equilíbrio torna-se menor). No entanto, observa-se novamente que a correção de área interfacial age no sentido contrário, acentuando a transferência de massa total e de alguma forma corrigindo o efeito da deformação das partículas fluidas.

CONCLUSÃO E SUGESTÕES

6.1 Conclusões deste Trabalho

Neste trabalho, um estudo sistemático foi realizado através do modelo *Volume-of-Fluid* (VOF) com objetivo de caracterizar de forma detalhada o escoamento e a transferência de calor ou massa ao redor de partículas fluidas em diferentes morfologias de interface.

Com o objetivo de melhor representar uma partícula fluida ascendendo em um meio infinito, o sistema de coordenadas referencial fixo foi alterado para um móvel, com origem fixada no centro da partícula fluida, através da modificação das condições de contorno originais e adição de termos fonte na equação da conservação da quantidade de movimento. Para a transferência de calor ao redor das partículas fluidas, em função das dificuldades associadas ao método implícito na captura da interface e da dificuldade de avaliar corretamente os fluxos na interface, resultante dos elevados gradientes encontrados na região interfacial, concluiu-se que os resultados de uma análise da transferência de calor local só poderiam ser considerados qualitativos. Assim, na análise da transferência de calor global, propôs-se uma forma alternativa para o cálculo do coeficiente de transferência de calor global. Esse valor foi obtido por meio de um balanço de energia global, no qual a temperatura da partícula foi mantida constante através da inclusão de um termo fonte na equação de conservação da energia.

Estudos comparativos foram desenvolvidos para verificar a metodologia proposta neste trabalho. Aspectos como a influência da mudança do sistema de coordenadas e do posicionamento das condições de contorno em relação ao tamanho da partícula fluida (*far-field*) foram sistematicamente estudado e validados. Também foi realizado um estudo detalhado de independência de malha, verificando também se a mesma era capaz de capturar adequadamente a camada limite térmica na superfície da partícula fluida.

Ao final da verificação da metodologia, os resultados numéricos obtidos para o coeficiente de transferência global de calor interfacial para partículas fluidas esféricas ou quase esféricas foram comparados com diferentes correlações para a transferência de calor ou massa encontrados na literatura, obtendo boa concordância. Nesta etapa, verificou-se ainda que, mesmo para partículas esféricas, a correlação de Ranz & Marshall (1952), que é a mais comumente utilizado em pacotes comerciais de CFD para o cálculo dos coeficiente de transferência de calor ou masas interfacial, subestima significativamente os valores dos coeficientes.

Uma vez verificada a metodologia, esta foi utilizada para o estudo sistemático da transferência de calor interfacial ao redor de partículas fluidas deformadas.

Uma análise local da transferência de calor foi realizada a partir de diferentes morfologias de interface para $Re \approx 20,0$ e para diferentes Re com um mesmo Eo através da análise dos perfis adimensionais da velocidade e dos fluxos de calor na interface. Os resultados mostraram que a deformação da partícula fluida afeta a distribuição local da transferência de calor ao longo da interface e que grande parte da transferência de calor ocorre na porção frontal da partícula. Além disso, como a partícula torna-se distorcida, o escoamento incide mais perpendicularmente à interface no hemisfério frontal, e o Nu_{local} nessa região diminui, o que explica a diminuição do Nu_{global} à medida que o Eo é aumentado, para os mesmos valores de Re , ou seja, a mesma velocidade de ascensão.

Os resultados obtidos da análise local da transferência de calor interfacial, embora apenas considerados de forma qualitativa, deram suporte aos resultados para a transferência de calor interfacial global. A análise global da transferência de calor interfacial mostrou que o número de Nusselt global Nu_{global} diminui conforme aumenta o número de Eo , ou seja, a deformação da partícula fluida ocasiona uma diminuição da

transferência de calor interfacial. Além disso, o efeito do aumento da superfície interfacial deve ser também incorporado no cálculo da transferência de calor global, uma vez que o diâmetro característico d_b utilizado na avaliação do coeficiente de transferência de calor global foi aquele baseado no volume das partículas fluidas, considerando o volume de uma esfera equivalente, mantido constante em todos os casos. Assim, foram propostas duas correlações, uma para a transferência de calor interfacial global, incorporando os efeitos da distorção das partículas fluidas a partir do número de Eo , e outra para a correção da área interfacial, em função da distorção das partículas fluidas.

Para observar os efeitos das correlações propostas para a transferência de calor interfacial e a correção da área interfacial no contexto do Modelo de Dois Fluidos, um simples caso de referência foi analisado através do modelo para diferentes situações; i) considerando a partícula como esférica e desprezando de maneira completa os efeitos da deformação, utilizando uma correlação da literatura para uma partícula fluida esférica; ii) considerando apenas a correlação proposta para a transferência de calor interfacial, admitindo que a deformação não alterava a densidade de área interfacial; iii) aplicando a correlação proposta para a transferência de calor interfacial e a correção da densidade de área interfacial.

A análise das três situações mostra que a influência da deformação da partícula fluida na transferência de calor ou massa interfacial torna-se importante à medida que os números de Re e Eo são aumentados. Conforme as partículas torna-se mais distorcidas, o número de Nusselt global Nu_{global} decresce e o uso de correlações para partículas esféricas superestima os fluxos interfaciais. Por outro lado, o aumento da área interfacial decorrente da deformação da partícula fluida tende a compensar o erro e assim, o uso de correlações para partículas esféricas considerando a área de uma esfera nas relações de fechamento para a transferência interfacial de calor/massa resulta em menores erros quando comparados a transferência total. No entanto, é importante notar que os efeitos da diminuição do número de Nusselt global Nu_{global} e do aumento da área interfacial por meio de $S_{razão}$ acabam de certa forma se compensando, apesar dos mesmos possuírem origens diferentes e os efeitos serem computados de formas separadas neste trabalho.

6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Este trabalho pode ser compreendido com uma estudo inicial do estudo da transferência de calor e de massa ao redor de partículas fluidas distorcidas. Assim, os resultados obtidos neste trabalho dão origem a uma grande possibilidade de estudos futuros:

- Estudo do problema em três dimensões, permitindo verificar o nível de precisão que a hipótese de axissimetria traz na modelagem do problema, mesmo para as situações estudadas aqui, em que o fluido da fase contínua é altamente viscoso;
- Desenvolvimento de um código computacional próprio que permita maior controle do procedimento numérico e maior possibilidade na modelagem do problema, através da adição de um método *Front-Tracking* para captura da interface. Dentro dessa proposta, sugere-se o estudo do problema de um modo mais completo, estudando o problema em três dimensões e adicionando um modelo de turbulência, de forma a poder considerar valores de Re mais elevados;
- Sob o aspecto numérico, propõe-se também a implementação de um algoritmo paralelo e uma técnica de refino adaptativo (AMR, do inglês *Adaptive Mesh Refinement*) para diminuição do tempo computacional, que costuma ser um impedimento neste tipo de estudo. Através do desenvolvimento de um código computacional próprio também seria possível estudar o acoplamento da transferência de calor e massa em uma única partícula fluida e estender o presente trabalho para estudar o comportamento de um escoamento com várias partículas fluidas e a interação entre as mesmas em uma análise global.

REFERÊNCIAS

BIBLIOGRÁFICAS

- ABOULHASANZADEH, B.; THOMAS, S.; TAEIBI-RAHNI, M.; TRYGGVASON, G. **Multiscale computations of mass transfer from buoyant bubbles.** *Chemical Engineering Science*, v. 75, pp. 456–467, 2012.
- ABOULHASANZADEH, B.; HOSODA, S.; TOMIYAMA, A.; TRYGGVASON, G. **A validation of an embedded analytical description approach for the computations of high Schmidt number mass transfer from bubbles in liquids.** *Chemical Engineering Science*, v. 101, pp. 165–174, 2013.
- ADEWUMI, M.; MUCHARAM, L. **Compositional Multiphase Hydrodynamic Modeling of Gas/Gas-Condensate Dispersed Flow in Gas Pipelines.** *SPE Production Engineering*, v. 5, n. 1, pp. 85–90, 1990.
- ANSYS. **CFX Release 15.0.** 2014.
- ANSYS. **FLUENT Release 15.0.** 2014.
- BOTHE, D.; FLECKENSTEIN, S. **A Volume-of-Fluid-based method for mass transfer processes at fluid particles.** *Chemical Engineering Science*, v. 101, n. 0, pp. 283 – 302, 2013.
- BOUSSINESQ, J. **Calcul du pouvoir refroidissant des fluides.** *Journal de mathematiques pures et appliquees*, pp. 285–332, 1905.
- BRACKBILL, J.; KOTHE, D. B.; ZEMACH, C. **A continuum method for modeling surface tension.** *Journal of computational physics*, v. 100, n. 2, pp. 335–354, 1992.
- CD-ADAPCO. **STAR CCM+ Version 7.06.** 2012.

- CHAO, B. **Motion of spherical gas bubbles in a viscous liquid at large Reynolds numbers.** *Physics of Fluids (1958-1988)*, v. 5, n. 1, pp. 69–79, 1962.
- CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. **Bubbles, drops, and particles.** Dover Publications, 2013.
- DARMANA, D.; DEEN, N. G.; KUIPERS, J. **Detailed 3D Modeling of Mass Transfer Processes in Two-Phase Flows with Dynamic Interfaces.** *Chemical engineering & technology*, v. 29, n. 9, pp. 1027–1033, 2006.
- FAGHRI, A.; ZHANG, Y. **Transport phenomena in multiphase systems.** Academic Press, 2006.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational methods for fluid dynamics**, vol. 3. Springer Berlin, 1996.
- FIGUEROA-ESPINOZA, B.; LEGENDRE, D. **Mass or heat transfer from spheroidal gas bubbles rising through a stationary liquid.** *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 23, pp. 6296–6309, 2010.
- HAELSSIG, J. B.; TREMBLAY, A. Y.; THIBAUT, J.; ETEMAD, S. G. **Direct numerical simulation of interphase heat and mass transfer in multicomponent vapour–liquid flows.** *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 53, n. 19, pp. 3947–3960, 2010.
- HAMIELEC, A.; JOHNSON, A.; HOUGHTON, W. **Numerical solution of the Navier-Stokes equation for flow past spheres: Part II. Viscous flow around circulating spheres of low viscosity.** *AIChE Journal*, v. 13, n. 2, pp. 220–224, 1967.
- HARLOW, F. H.; WELCH, J. E. **Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface.** *Physics of fluids*, v. 8, p. 2182, 1965.
- HASE, M.; WEIGAND, B. **Transient heat transfer of deforming droplets at high Reynolds numbers.** *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, v. 14, n. 1, pp. 85–97, 2004.
- HAYASHI, K.; TOMIYAMA, A. **Interface tracking simulation of mass transfer from a dissolving bubble.** *The Journal of Computational Multiphase Flows*, v. 3, n. 4, pp. 247–262, 2011.

- HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. **Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries.** *Journal of computational physics*, v. 39, n. 1, pp. 201–225, 1981.
- HUA, J.; LOU, J. **Numerical simulation of bubble rising in viscous liquid.** *Journal of Computational Physics*, v. 222, n. 2, pp. 769–795, 2007.
- HUA, J.; STENE, J. E.; LIN, P. **Numerical simulation of 3D bubbles rising in viscous liquids using a front tracking method.** *Journal of Computational Physics*, v. 227, n. 6, pp. 3358–3382, 2008.
- ISHII, M.; HIBIKI, T. **Thermo-fluid dynamics of two-phase flow.** Springer, 2011.
- KANTARCI, N.; BORAK, F.; ULGEN, K. O. **Bubble column reactors.** *Process Biochemistry*, v. 40, n. 7, pp. 2263–2283, 2005.
- KOYNOV, A.; KHINAST, J. G.; TRYGGVASON, G. **Mass transfer and chemical reactions in bubble swarms with dynamic interfaces.** *AIChE journal*, v. 51, n. 10, pp. 2786–2800, 2005.
- KRISHNA, R.; VAN BATEN, J. **Scaling up bubble column reactors with highly viscous liquid phase.** *Chemical engineering & technology*, v. 25, n. 10, pp. 1015–1020, 2002.
- KRISHNA, R.; VAN BATEN, J. **Mass transfer in bubble columns.** *Catalysis Today*, v. 79, pp. 67–75, 2003.
- LAFABURIE, B.; NARDONE, C.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S.; ZANETTI, G. **Modelling Merging and Fragmentation in Multiphase Flows with {SURFER}.** *Journal of Computational Physics*, v. 113, n. 1, pp. 134 – 147, 1994.
- LECLAIR, B.; HAMIELEC, A. **Viscous flow through particle assemblages at intermediate Reynolds numbers – a cell model for transport in bubble swarms.** *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 49, n. 6, pp. 713–720, 1971.
- LIOVIC, P.; LAKEHAL, D. **Multi-physics treatment in the vicinity of arbitrarily deformable gas–liquid interfaces.** *Journal of Computational Physics*, v. 222, n. 2, pp. 504–535, 2007.

- LIU, L.; YAN, H.; ZHAO, G. **Experimental studies on the shape and motion of air bubbles in viscous liquids.** *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 62, pp. 109–121, 2015.
- LOCHIEL, A.; CALDERBANK, P. **Mass transfer in the continuous phase around axisymmetric bodies of revolution.** *Chemical Engineering Science*, v. 19, n. 7, pp. 471–484, 1964.
- MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas.** Livros Técnicos e Científicos, 1994.
- MARSCHALL, H.; HINTERBERGER, K.; SCHUELER, C.; HABLA, F.; HINRICHSEN, O. **Numerical simulation of species transfer across fluid interfaces in free-surface flows using OpenFOAM.** *Chemical Engineering Science*, v. 78, pp. 111–127, 2012.
- OELLRICH, L.; SCHMIDT-TRAUB, H.; BRAUER, H. **Theoretische berechnung des stofftransports in der umgebung einer einzelblase.** *Chemical Engineering Science*, v. 28, n. 3, pp. 711–721, 1973.
- OHTA, M.; IMURA, T.; YOSHIDA, Y.; SUSSMAN, M. **A computational study of the effect of initial bubble conditions on the motion of a gas bubble rising in viscous liquids.** *International journal of multiphase flow*, v. 31, n. 2, pp. 223–237, 2005.
- OLSSON, E.; KREISS, G. **A conservative level set method for two phase flow.** *Journal of Computational Physics*, v. 210, n. 1, pp. 225–246, 2005.
- OSHER, S.; SETHIAN, J. A. **Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations.** *Journal of computational physics*, v. 79, n. 1, pp. 12–49, 1988.
- PANDELAERS, L.; VERHAEGHE, E.; WOLLANTS, P.; BLANPAIN, B. **An implicit conservative scheme for coupled heat and mass transfer problems with multiple moving interfaces.** *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 54, n. 5, pp. 1039–1045, 2011.
- RANZ, W.; MARSHALL, W. **Evaporation from drops.** *Chem. Eng. Prog.*, v. 48, n. 3, pp. 141–146, 1952.

- ROSA, E. S. **Escoamento Multifásico Isotérmico: Modelos de Multifluidos e de Mistura**. Bookman, 2012.
- SETHIAN, J.; SMEREKA, P. **Level set methods for fluid interfaces**. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 35, n. 1, pp. 341–372, 2003.
- SINGH, M. K.; MAJUMDER, S. K. **Co-and counter-current mass transfer in bubble column**. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 54, n. 11, pp. 2283–2293, 2011.
- SUSSMAN, M.; PUCKETT, E. G. **A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows**. *Journal of Computational Physics*, v. 162, n. 2, pp. 301–337, 2000.
- SUSSMAN, M.; SMEREKA, P.; OSHER, S. **A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow**. *Journal of Computational physics*, v. 114, n. 1, pp. 146–159, 1994.
- TAKEMURA, F.; YABE, A. **Gas dissolution process of spherical rising gas bubbles**. *Chemical engineering science*, v. 53, n. 15, pp. 2691–2699, 1998.
- UBBINK, O. **Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces**. Ph.D. Thesis, University of London UK, 1997.
- UNVERDI, S. O.; TRYGGVASON, G. **A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows**. *Journal of computational physics*, v. 100, n. 1, pp. 25–37, 1992.
- VINCENT, P.; ADEWUMI, M. **Engineering design of gas-condensate pipelines with a compositional hydrodynamic model**. *SPE Production Engineering*, v. 5, n. 4, pp. 381–386, 1990.
- WALLIS, G. B. **One-dimensional two-phase flow**, vol. 1. McGraw-Hill New York, 1969.
- WANG, J.; LU, P.; WANG, Z.; YANG, C.; MAO, Z.-S. **Numerical simulation of unsteady mass transfer by the level set method**. *Chemical Engineering Science*, v. 63, n. 12, pp. 3141–3151, 2008.
- WINNIKOW, S. **Letter to the editors**. *Chemical Engineering Science*, v. 22, n. 3, pp. 477 –, 1967.

- YAN, K.; CHE, D. **Hydrodynamic and mass transfer characteristics of slug flow in a vertical pipe with and without dispersed small bubbles.** *International journal of multiphase flow*, v. 37, n. 4, pp. 299–325, 2011.
- YANG, C.; MAO, Z. **An improved level set approach to the simulation of drop and bubble motion.** *Chinese Journal of Chemical Engineering*, v. 10, n. 3, pp. 263–272, 2002.
- YANG, C.; MAO, Z.-S. **Numerical simulation of interphase mass transfer with the level set approach.** *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 10, pp. 2643–2660, 2005.
- YOUNGS, D. L. **Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion.** *Numerical methods for fluid dynamics*, v. 24, pp. 273–285, 1982.
- ZAGHLOUL, J.; ADEWUMI, M.; ITYOKUMBUL, M. T., 2007. Compositional modeling of two-phase (gas/water) flow in gathering and transmission pipeline systems. In: *Eastern Regional Meeting*.